

118

Jaakko Paasivirta, Pirjo Mikkelsen ja Reino Lammi

Happikemikaalien käyttöön perustuvan massanvalkaisun ympäristövaikutuksia

Vaihe II. Vaikutusten ja orgaanisten yhdisteiden pitoisuuksien
monimuuttuja-analyysi

118

Jaakko Paasivirta, Pirjo Mikkelsen ja Reino Lammi

Happikemikaalien käyttöön perustuvan massanvalkaisun ympäristövaikutuksia

Vaihe II. Vaikutusten ja orgaanisten yhdisteiden pitoisuuksien
monimuuttuja-analyysi

Helsinki 1998
SUOMEN YMPÄRISTÖKESKUS

ISBN 952-11-0293-4
ISSN 1455-0792

Painopaikka: Oy Edita Ab
Helsinki 1998

SISÄLLYS

TIIVISTELMÄ	5
ENGLISH SUMMARY	6
1. TUTKIMUKSEN TAUSTA JA TAVOITTEET.....	7
2. MONIMUUTTUJA-ANALYYSIT	7
2.1 Metodit	7
2.2 Kemiallisen koostumuksen PCA-tarkastelu	8
2.3 Akuuttien myrkyvaikutusten PCA.....	9
2.3.1 Yhdisteryhmien tarkastelu	9
2.3.2 Yksittäisten yhdisteiden PCA	10
2.4 Krooniset vaikutukset kaloihin	14
2.4.1 Yhdisteryhmien ja vaikutusten PCA	14
2.4.2 Yksittäisten yhdisteiden ja kalavaikutusten PCA	16
2.5 Sinisimpukan kasvu	19
2.5.1 Kasvun ja yhdisteryhmien PCA	19
2.5.2 Kasvun ja yksittäisten yhdisteiden vaihtelun PCA	20
2.6 Kolmipiikin rakennemuuttajat	21
2.6.1 PCA yhdisteryhmien pitoisuuksien vaihtelun kanssa	21
2.6.2 PCA yksittäisten yhdisteiden vaihtelun kanssa	21
2.7 Sedimentin eliöiden biomassassa	23
2.7.1 PCA yhdisteryhmien kanssa	23
2.7.2 Yksittäisten yhdisteiden ja sedimenttivaikutusten PCA	24
2.8 Rakkolevän eliöyhteisön biomassassa	26
2.8.1 PCA yhdisteryhmien kanssa	26
2.8.2 Yksittäisten yhdisteiden ja rakkolevävaikutusten PCA	28
3. YHTEENVETO JA JOHTOPÄÄTÖKSET	32
4. KIRJALLISUUSLUETTELO.....	36
LIITE 1. Akuuttivaikutusten ja aineiden monimuuttuja-analyysi.....	37
LIITE 2. Kroonisten kalavaikutusten ja aineiden monimuuttuja-analyysi.....	47
LIITE 3. Sinisimpukan kasvun ja yhdisteiden pitoisuuksien monimuuttuja-analyysi.....	72
LIITE 4. Kolmipiikin rakennemuuttajien ja yhdisteiden pitoisuuksien monimuuttuja-analyysi.....	76
LIITE 5. Sedimentin biomassan ja yhdisteiden pitoisuuksien monimuuttuja-analyysi.....	82
LIITE 6. Rakkolevän eliöyhteisön biomassan ja yhdisteiden pitoisuuksien monimuuttuja-analyysi.....	100
LIITE 7. Näytteet, biol. vaikutukset ja yhdisteryhmät: lyhenteet.....	117

TIIVISTELMÄ

Laboratoriossa testatut akuutit myrkkyyvaikutukset sekä mesokosmoksessa mitatut krooniset efektit pyrittiin selittämään 22 yhdisteryhmän ja 323 yksittäisen yhdisteen pitoisuuksien vaihtelulla tutkimusnäytteissä (TCF-, ECF-, SUO- ja KUNTA-vedet). Alustavana tilastokäsittelynä tulostettujen kaksisuuntaisten Pearson-korrelaatioiden perusteella valittiin voimakkaimmin kunkin vaikutuksen kanssa korreloivat aineet pääkomponenttianalyysiin (PCA ja PC-regressio), jolla haettiin todennäköisimmin ao. efektiin osallistuvia ryhmiä ja yhdisteitä.

Tilastollisesti merkitsevää ($p < 0.01$ **) akuuttimyrkyllisyyttä osoittivat yhdisteryhmistä vain alifaattiset karboksylihapot levänkasvun estotestissä. Yksittäisistä yhdisteistä merkitseviksi akuuttimyrkyiksi tulivat voihapo, heptaanihapo ja dodekaanihapo levänkasvulle, heptadekaanihapo ja heptenyylisykloheksaani valobakteereille sekä dimetyyliheksaanihapo ja heksakosaani mitokondriotestissä.

Yhdisteryhmistä tilastollisesti merkitseviksi kasvun inhibiittoreiksi tulivat alifaattiset karboksylihapot rakkoleväyhteisön eliöille, tyydyttymättömät hiilivedyt koko rakkoleväyhteisölle, aldehydit, amidit, ketonit, fosfaatit ja esterit kukin vain yhdelle mesokosmoksen eliölajille sekä ftalaatit kolmelle sedimentin lajille. Merkitseviä stimulantteja olivat tilastokäsittelyn perusteella alkoholit, rikkiyhdisteet ja tyydyttymättömät hiilivedyt kukin vain yhdelle eliölajille.

Yksittäisistä yhdisteistä monimuuttuja-analyysi näytti merkitseviksi inhibiittoreiksi kymmenen ainetta: bentsoehapon ja 1-metyyli-4-(1-metyylietyyli)-sykloheksaanidiolin kalan hemoglobiinille, ftalaatin ja tetrakosaanin kalan maksaindeksille, palmitiinihapon sedimenttieliöille, tetrakosaanin ja pentakosaanijohdoksen koko rakkoleväyhteisölle, heksaanihapon rakkoleväyhteisön eliöille, pentaanihapon rakkolevän *Lymnealle* sekä 4-tridekanonin ja asetyyli-dihydroksi-dimetyyli-bentsofuranyyli-pentaanidionin rakkolevän *Theodoksukselle*.

Merkitseviä stimulantteja havaittiin viisi, joista kalan veriarvoja kasvattivat heptaanihapo, haaraunut pentakosaani ja 1,3-bis-metyleenisyklopentaani. Viimemainittu edisti myös sedimentin *Macoman* ja rakkoleväeliöiden kasvua. Merkitsevä sedimentin *Lymnean* stimulantti oli tilastoajon tuloksen mukaan 2-metyyli-2-pentaanitioli ja rakkolevän *Lymnealle* puolestaan eikosaani.

Tulosten perusteella voidaan valita jätevesien mahdollisten ekologisten vaikutusten kannalta mielenkiintoisimmat yhdisteet malliaineiksi, joilla tehdään lopullinen identifiointi ja kehitetään tarkka analytiikka. Malliaineita voidaan sitten käyttää ekotoksisuustutkimuksissa yksittäisillä yhdisteillä ja niiden kombinaatioilla sekä prosessien parantamisessa.

ENGLISH SUMMARY

Multivariate statistics was performed to explain the results of acute toxicity and mesocosms tests done with moor, communal, ECF and TCF water samples by variation of the contents of compound groups (22) and individual substances (323) in these waters. Two-sided Pearson correlations of each effect with substance variations (reported earlier) were used to select variables to principal component analysis (PCA) and PC-regression for search of the most probably effective compound groups and individual substances.

According to PC regression, a statistically significant ($p > 0.01^{**}$) group was aliphatic carboxylic acids in *Algae* growth test. Individual significant toxicants were butyric, heptanoic and dodecanoic acids to *Algae* growth, heptadecanoic acid and heptenyl cyclkohexane to light bacteria, and dimethyl hexanoic acid and hexacosane in *Mitokondria* test.

PC-regression selected the following compound groups as significant inhibitors for some mesocosms species: aliphatic carboxylic acids, unsaturated hydrocarbons, aldehydes, amides, ketones, phosphates esters and phtalates. According to statistics, significant stimulating groups were alcohols, sulfur compounds and unsaturated hydrocarbons, each to one species only.

From individual substances, PC regression showed as significant inhibitors in mesocosmos ten compounds: bezoic acid and 1-methyl-4-(1-methylethyl)-cyclohexanediol to fish hemoglobine, a phtalate and tetracosane to fish liver index, palmitic acid to sediment biota, tetracosane and a pentacosane derivative to the whole bladder wrack community, hexanoic acid to bladder wrack fauna, pentanoic acid to bladder wrack *Lymnea* and 4-tridecanone and a complex pentanedione derivative to bladder wrack *Theodoxus*. Five significant individual mesocosms stimulants were observed: heptanoic acid, branched pentacosane and 1,3-bis-methylene cyclopentane. The latter stimulated significantly also growth of sediment *Macoma* and bladder wrack fauna. The other two significant stimulants were 2-methyl-2-pentane thiol to sediment *Lymnea* and eicosane to bladder wrack *Lymnea*.

The results can be utilized in selecting the compounds which are most interesting for studies of the ecological effects of wastewaters. Model substances of these compounds serve in final identification of the suspected effective substances and in development of their accurate analyses. Then, the model compounds can be used in ecotoxicity studies with individual substances and with their combinations. Further, they are useful when improvements of the industrial processes emitting wastewaters are performed.

1. TUTKIMUKSEN TAUSTA JA TAVOITTEET

Tutkimus on viimeinen vaihe monivuotisessa happivalkaisuprojektissa, jota on jo alustavasti esitelty myös kansainvälisesti (Ruonala ja Lammi 1997; Ahtiainen ym. 1997, Tana ym. 1997, Mikkelson ja Paasivirta 1997). Projektin biologisten tutkimusten tulokset on tarkemmin esitetty tämän raporttisarjan alkuosissa (Lehtinen ym. 1998, Tana ym. 1998), Vaikutusmittausten ja kemiallisen karakterisoinnin tilastollisen vertailun menetelmää kehitettiin aikaisemman valkaisuprosessivesien mesokosmostutkimuksen yhteydessä (Paasivirta ja Mikkelson 1997).

Tutkimuksen tavoitteena oli hakea ECF- ja TCF-prosessivesien orgaanisten yhdisteiden joukosta ne, jotka todennäköisimmin vaikuttavat tutkituissa akuuttimyrkyllisyystesteissä tai kroonisissa mesokosmosefekteissä. Tunnettujen aineiden todellisetkin pitoisuudet voidaan tuloksista määrittää malli- ja standardiaineiden vertailuajoilla saatavien responssisuhteiden perusteella. Mikäli vaikutuksiin liittyvästä yhdisteestä ei ole malliainetta, se voidaan syntetisoida rakenneanalyysin varmistusta, kvantitoiteja sekä vaikutustutkimuksia varten. Tulosten perusteella tehtävät malliainesynteetit sekä lopulliset kvantitoinnit eivät sisällyneet tähän tutkimusvaiheeseen.

2. MONIMUUTTUJA-ANALYYSIT

2.1 Metodit

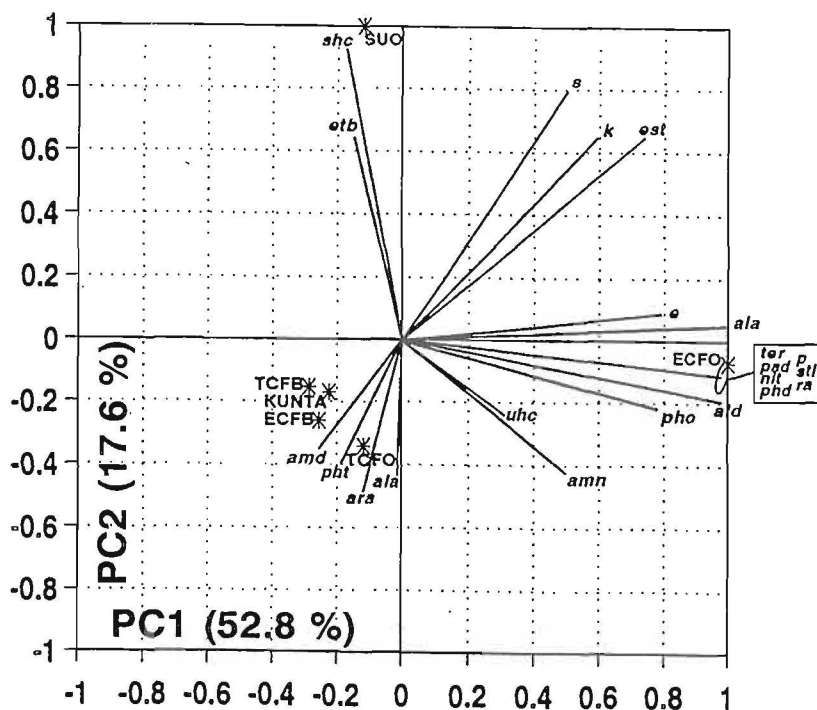
Tilastokäsittelyyn käytettiin SPSS-ohjelmistoa. Pearson-korrelaatiot kaikkien vaikutusmuuttujien ja kemiallisessa karakterisoinnissa tunnistetujen yhdisteiden ryhmien (22) ja yksittäisten yhdisteiden (323) kesken on esitetty edellisessä raportissa (Paasivirta ja Mikkelson 1998), jonka Liite 1 esittää yhdisteiden nimet, koodit ja pitoisuudet. Sitten, kukin vaikutusmuuttuja pyrittiin selittämään yhdisteiden pitoisuuksilla käyttämällä pääkomponenttianalyysiin (PCA) liitettyä monimuuttujaregressiota. PCA:ssa verrattiin kunkin vaikutusmuuttujan vaihtelua karakterisoinnissa määritettyjen yhdisteryhmien sekä a.o. vaikutuksen kanssa voimakkaasti korreloivien yksittäisten yhdisteiden pitoisuusvaihteluun. Mukaan otettiin, voimakkaasti korreloivien aineiden lukumäärästä riippuen, yhdisteet, joiden korrelaatiokertoimen itseisarvo $|R|$ oli suurempi kuin 0.4, 0.5 tai 0.6. PCA:ssa muodostettiin suuresta joukosta muuttujia muutama uusi muuttuja (PC1, PC2, PC3 jne), jotka ovat

keskenään ortogonaalisia ($R = 0$), mutta sisältävät kaiken informaation muuttujien vaihtelusta. PCA soveltui erinomaisesti aineistolle, koska kaikki yhdistemuuttujat oli mitattu samoilla suureilla (pitoisuus $\mu\text{g/L}$). Jos 2-3 ensimmäistä pääkomponenttia selittivät valtaosan variaatiosta, voitiin vaikutusten todennäköisiä aiheuttajia havaita PCA-kuvauksista: muuttujalataukset (loadings) ja näytepiste-arvot (scores), jotka voitiin esittää myös BILOT-kuvauksilla. Varmemmin, ja useampien tärkeiden pääkomponenttien esiintyessä, selitettiin vaikutusmuuttujan pääkomponenttijakaantumaa voimakkaasti korreloivien yhdisteiden pääkomponenttijakaantumalla; toisin sanoen tehtiin PC-regressio poimivalla versiolla (SPSS-ohjelmistossa STEPWISE MULTIPLE LINEAR REGRESSION). Edellä esitetty menettely sisältyy Jolliffe'n (1986) PCA-opikirjaan. Näytteiden, vaikutusmuuttujien ja yhdisteryhmien lyhenteet ja nimet on esitetty myös tämän raportin liitteessä 7.

2.2 Kemiallisen koostumuksen PCA-tarkastelu

Pääkomponenttianalyysi yhdisteryhmien pitoisuuden vaihtelusta näytteissä (Liite 1; Kuva 1) osoittaa, että käsittelemätön ECF-valkaisujätevesi poikkeaa muista sisältäen runsaasti aktiivilietekäsittelyssä hajoavia aineita. Suovesi eroaa muista tyydyttyneiden hiilivetyjen (SHC) runsauden osalta.

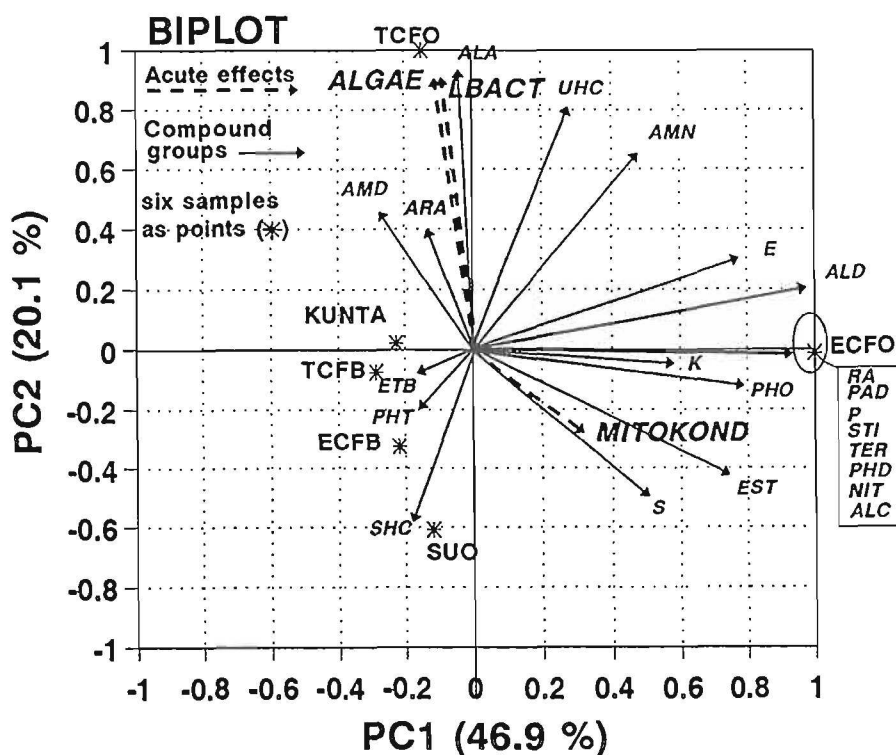
Kuva 1.
Yhdisteryhmien vaihtelu PCA:n BILOT-kuvana missä muuttujien (yhdisteryhmien) lataukset on esitetty vektoreina ja näytteiden skaalatut piste-arvot (scores) pisteinä (*).



2.3 Akuuttien myrkyvaikutusten PCA

2.3.1 Yhdisteryhmien tarkastelu

Kolmen akuuttitoksisuuden (ALGAE, LBACT ja MITOKOND) ja 22 yhdisteryhmän (taulukot 1 ja 2, Paasivirta ja Mikkelsen 1998) vaihtelua verrattiin PCA:lla. Kaksi pääkomponenttia (PC1 ja PC2) pystyi selittämään 67 % koko aineiston vaihtelusta kuudessa näytevedessä. Kuvassa 2 (biplot-kuvaus) on esitetty toksisuusmuuttujien ja kaikkien 22 yhdisteryhmän pääkomponenttilataukset vektoreina, joiden pituus vastaa selityksen merkitsevyyttä. Näytteiden skaalatut piste-arvot (suurin itseisarvo 1) pääkomponenttien funktiona esitetään kuvassa tähtinä.



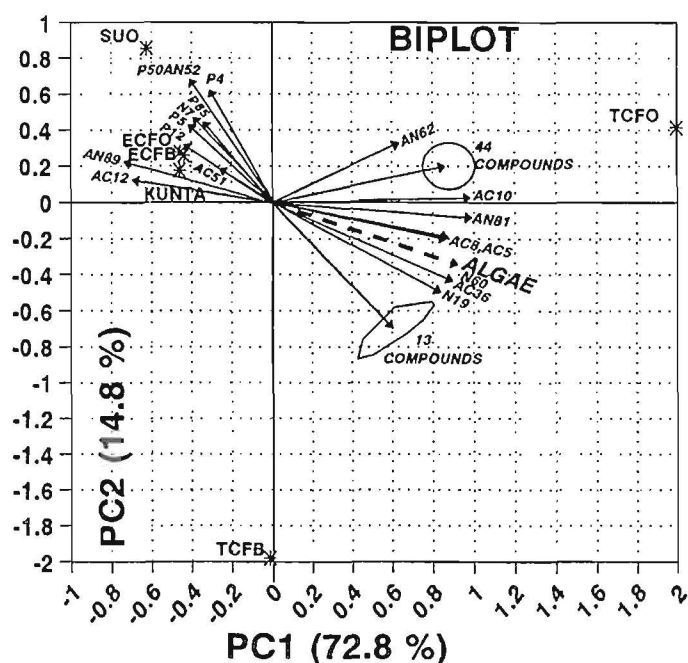
Kuva 2. PCA-biplot-kuvaus toksisuustestien tulosten vaihtelun vertailusta 22 yhdisteryhmän vaihteluun. Näytteiden piste-arvot on skaalattu maksimiin 1.0.

Kuvassa 2 esiintyy MITOKOND-vektori lyhyenä, mikä havainnollistaa sitä, että mitkään havaitut vaikutukset mitokondrioihin eivät korreloineet merkittävästi (p-arvo oli suurempi kuin 0.01) aineryhmien kanssa. Sen sijaan ALGAE- ja LBACT-latausvektorit ovat lähellä yksikköpituutta ja koostuvat lähes kokonaan PC2-arvoista päättyen lähelle näytepistettä TCFO. Tämä tarkoittaa, että käsittelemättömän TCF-jäteveden orgaani-

silla komponenteilla esiintyy merkittävä myrkkövaikutus sekä levä- että valobakteeritesteissä. Pitkä ALA-latausvektori osoittaa, että alifaattisten karboksyylihappojen ryhmä voi olla näiden vaikutusten päälähte. Kuvan 2 perusteella myös tyydyttymättömillä hiilivedyillä (UHC) voi myös olla osuutta LBACT- ja ALGAE- efekteihin. PC-regressiolla tuli merkitseväksi myrkyksi (+)** ainoastaan ALA-ryhmä LBACT-efektille. Rikkiyhdisteille (S) saatu merkitsevä negatiivinen regressiokerroin (-)** viittaa mahdolliseen vastamyrkkyyteen tässä ryhmässä.

2.3.2 Yksittäisten yhdisteiden PCA

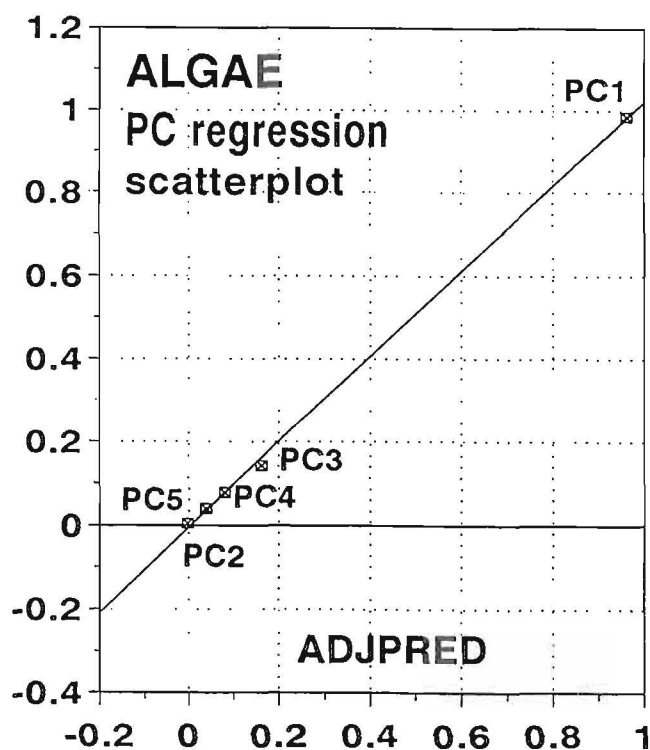
Yksittäisten yhdisteiden ja akuuttitoksisuuksien PCA:n valittiin voimakkaasti korreloivat aineet (Taulukko 6, Paasivirta ja Mikkelsen 1998). Levänkasvun eston (ALGAE) kanssa testattiin 74 yhdistettä, joiden korrelaatioiden itseisarvo $|R| > 0.5$. PCA on esittely liitteessä 1. Kaksi ensimmäistä pääkomponenttia selitti 87.6 % koko ALGAE-efektin vaihtelusta. Kuvan 3 perusteella suuri osa valituista yhdisteistä saattoi olla vaikuttavia aineita (+) levänkasvun estossa: latausvektorit olivat lähes samansuuntaisia kuin ALGAE-vektori. Yhdisteet, joiden latausvektorit ovat vastakkaisia (-), ovat mahdollisia "vastamyrkkyjä".



KUVA 3. Levätestitulosten (ALGAE) pääkomponenttianalyysi:

BI PLOT-kuvaus ALGAE:n ja sen kanssa voimakkaasti korreloivan 74 yksittäisen yhdisteen pitoisuuksien vaihtelusta. Näytepistearvot ovat alkuperäisiä (ei skaalattuja).

PC-regressio tehtiin ensin kaikkien 74 yhdisteen viidellä pääkomponentilla. Kolmen aineen PC:t selittivät ALGAE-efektin PC:n erittäin suurella F-arvon (neliösummien keskiarvojen suhteen) merkitsevyydellä ($p = 0.0005^{***}$). Kuitenkin selittäjistä vain yhden, heptaanihapon (AC12), kulmakerroin oli positiivisen merkitsevä ($p = 0.0032^{**}$). Kaksi voimakkaampaa selittäjää olivat mahdollisia vastamyrkkyjä negatiivisella kulmakertoimella: pentadekaanihappo (AC51 $p = 0.0015^{**}$) ja eikosaani (P50AN52 $p = 0.0004^{***}$). Seuraavana vaiheena PC-taulukosta valittiin 23 yhdistettä, joilla kolme ensimmäistä pääkomponenttia oli lähinnä ALGAE-muuttujan arvoja sekä voimakkain vastaiset arvot omaava P50AN52 (eikosaani). Näille 24 muuttujalle ja ALGAE:arvoille muodostettiin uudet viisi pää-komponenttia, joilla tehtiin lopullinen PC-regressio (Liite 1). Regression lineaarisuus havainnollistetaan kuvassa 4.

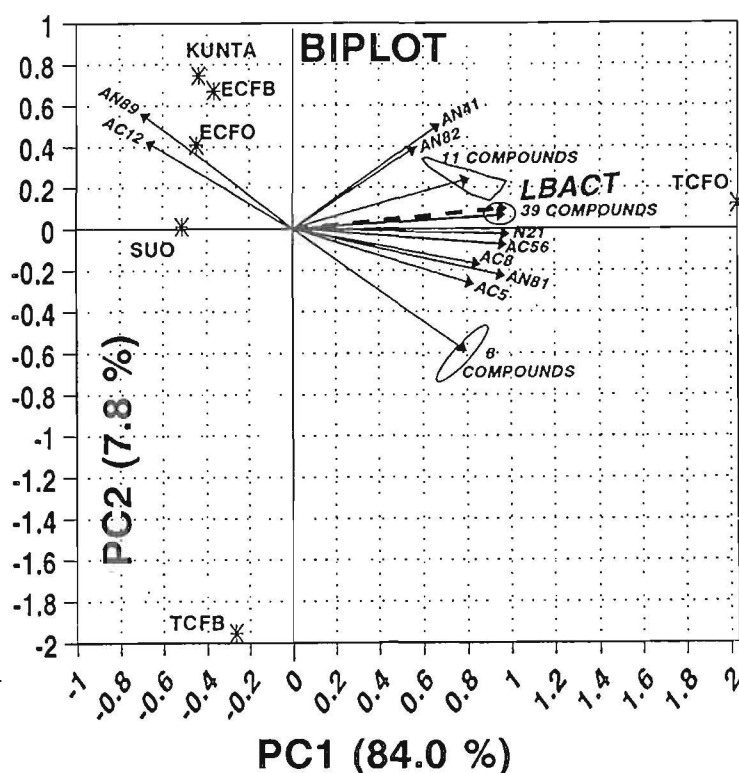


Kuva 4. ALGAE-efektin havaintoja vastaavat ja poimivalla lineaarisella regressiolla (viisi pääkomponenttia 24 yhdisteen PCA:sta) lasketut (ADJPRED) arvot sekä regressiosuora ("scatterplot").

Yllämainitulla ALGAE:n ja 24 yhdisteen PC-regressiolla (Kuva 4; Liite 1) saatiin merkitseviksi ehdokkaiksi levänkasvun estäjinä seuraavat yhdisteet:

Dodekaanihappo (AC36)	$p = 0.0037^{**}$
Voihappo (AC5)	$p = 0.0063^{**}$
Jokin ftalaatti (N86)	$p = 0.0194^{*}$

Vastaava PCA-käsittely tehtiin valobakteeritoksisuudelle (LBACT) aluksi 67 yhdisteen ($|R| > 0.6$) kanssa (Liite 2). PC-regression tuloksena oli kaksi merkitsevää (positiivisen kulmakertoimen) myrkkyä: heptadekaanihappo (AC58; $p = 0.0001^{***}$) ja jokin fenolijohdos (P26; $p = 0.0032^{**}$). Kahden ensimmäisen pääkomponentin biplot-esitys (91.8 % vaihtelusta) on kuvassa 5.

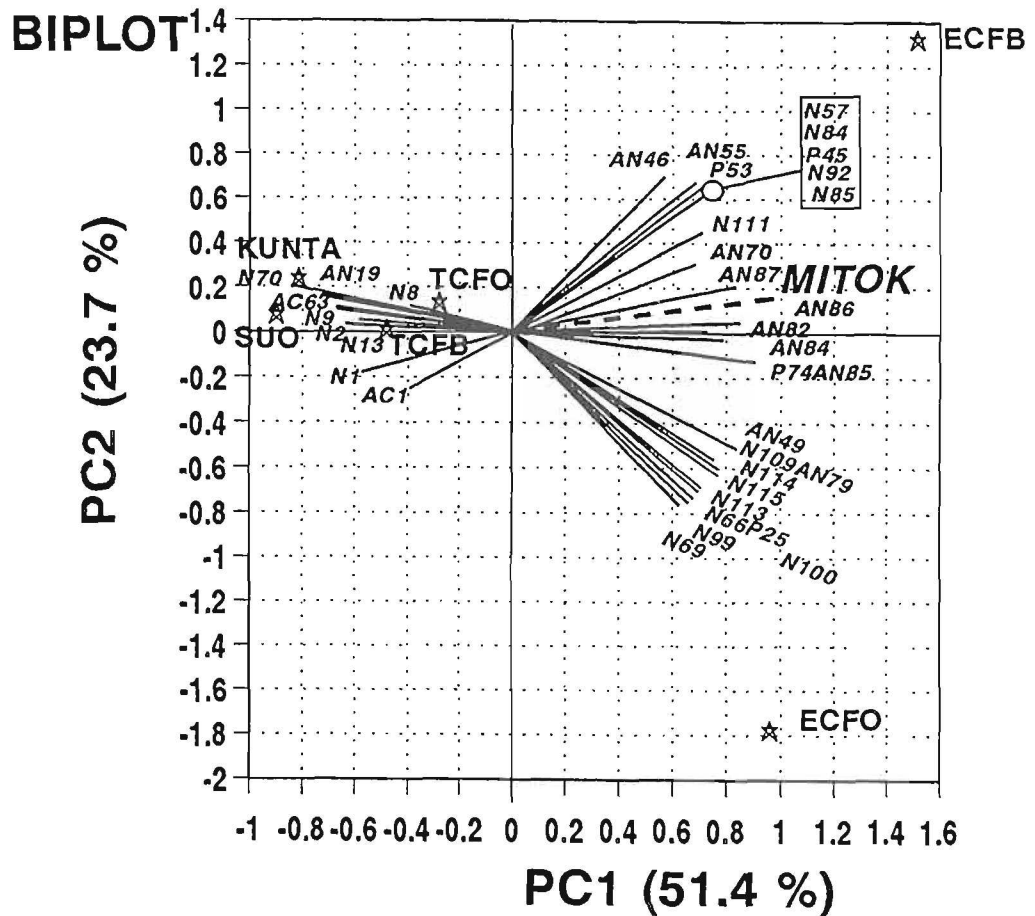


Kuva 5. Biplot-esitys LBACT-efektin ja 67 voimakkaasti sen kanssa korreloivan yhdisteen pitoisuuksien vaihtelusta kahden ensimmäisen pääkomponentin avulla.

Kuvan 5 perusteella näyttää siltä, että suurella joukolla yhdisteitä olisi sama vaihtelu kuin itse valobakteeriefektillä LBACT. Kuitenkin, vaikka varsin monella yhdisteellä ensimmäinen ja toinen PC olivat lähellä LBACT-efektin arvoja, monilla kolmas pääkomponentti poikkesi niistä. Tämän takia voitiin useita selittäviä muuttujia realistisempaa toista PC-regressiota varten (Liite 1). Valitut 11 yhdistettä antoivat uudessa viiden PC:n analyysissä seuraavat erittäin merkitsevät ehdokkaat vaikuttaviksi aineiksi:

Myrkkyjä (+):	heptadekaanihappo (AC58)	$p = 0.0000^{***}$
ja	heptenyylisykloheksaani (P8)	$p = 0.0000^{***}$
Vastamyrkkyä (-):	haarautunut eikosaani (P58)	$p = 0.0001^{***}$

Myös MITOKOND-efektille, jolla ei esiintynyt yhtään merkitsevää ($p < 0.01^{**}$) kaksisuuntaista Pearson-korrelaatiota, löydettiin PCA:lla merkitseviä vaikuttajaehtokkaita (Liite 1). Ensin tehtiin 33 voimakkaasti korreloivan yhdisteen kanssa PCA, missä kaksi ensimmäistä pääkomponenttia selitti 75.3 % koko vaihtelusta (Kuva 6).



Kuva 6. Biplot-esitys MITOKOND-efektin ja 33 voimakkaasti korreloivan yhdisteen pitoisuuksien vaihteluista kahden ensimmäisen pääkomponentin avulla.

Kuvan 6 ja viiden pääkomponentin arvojen tarkastelun avulla valittiin 24 lähinnä MITOK:in PC-arvoja ja niiden vastakkaisia arvoja antanutta yhdistettä uuteen PCA:n, missä lasketuilla viidellä PC:llä tehtiin poimiva lineaarinen regressio MITOK-arvojen selittämiseksi (Liite 1). Tuloksena saatiin seuraavat merkitsevät ehdokkaat vaikuttaviksi aineiksi:

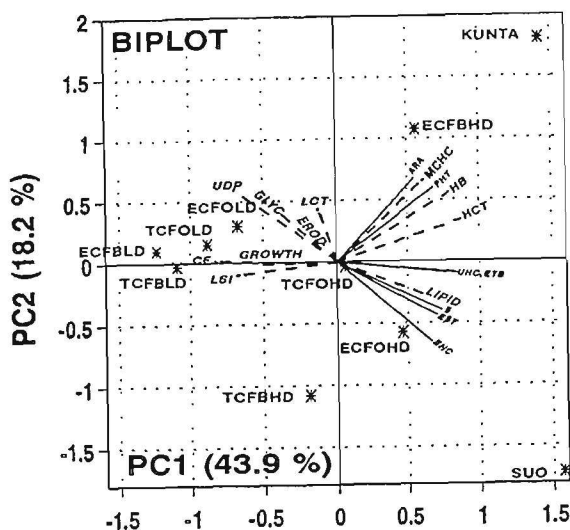
Myrkkyyjä (+)	dimetyyliheksaanihappo (AC13)	$p = 0.0018^{**}$
ja	heksakosaani (P74AN85)	$p = 0.0040^{**}$
Vastamyrkkyyä (-)	1-metyyli-4-(1-metyylietyyli)-	
	1,2-sykloheksaanidioli (N70)	$p = 0.0077^{**}$

2.4 Krooniset vaikutukset kaloihin

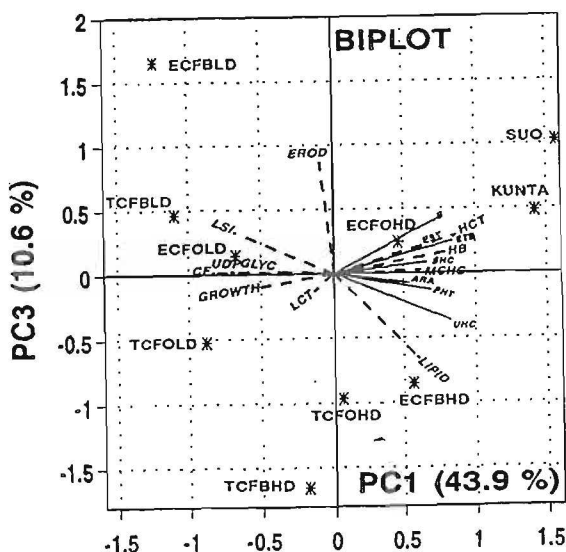
2.4.1 Yhdisteryhmien ja vaikutusten PCA

Pearson-korrelaatioiden perusteella (Taulukko 9, Paasivirta ja Mikkelsen 1998) valittiin seitsemän yhdisteryhmää, jotka korreloivat voimakkaasti ($|R| > 0.5$) ainakin jonkin yhdentoista mesokosmoksessa mitatun kirjolohien vaikutusparametrin kanssa. Näillä muuttujilla tehtiin PCA (Liite 2): tuloksista projisioitiin kaksi BIPLLOT-esitystä (Kuva 7 ja Kuva 8) PC1/PC2 ja PC1/PC3 tasoihin. Pääkomponenttien PC1, PC2 ja PC3 (Kuvat 7 ja 8) perusteella todennäköisimmät yhdisteryhmien vaikutukset on esitetty taulukossa 1. Vektorien vastakkaisuus (inhibitio) on esitetty miinusmerkillä (-) ja samansuuntaisuus (stimulointi) plusmerkillä (+) merkkien lukumäärä kuvaa vaikutuksen todennäköisyysastetta, mikä on arvioitu vektorien suunnista ja pituuksista.

Kuva 7.
Kroonisten kalavaikutusten ja seitsemän yhdisteryhmän pääkomponenttiprojektio PC1/PC2-tasossa.



Kuva 8.
Kroonisten kalavaikutusten ja seitsemän yhdisteryhmän pääkomponenttiprojektio PC1/PC3-tasossa.



TAULUKKO 1. Kuvista 7 (PC:t 1,2) ja 8 (PC:t 1,3) arvioitu inhibitio (-) tai stimulaatio (+) kroonisiin kirjolohivaikutuksiin.

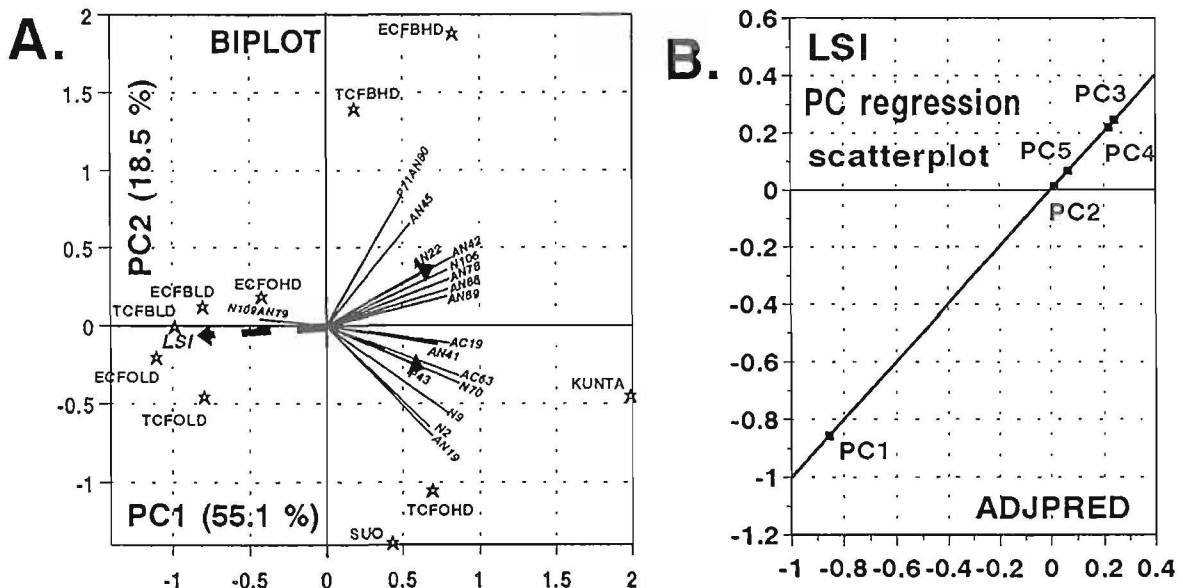
Vaikutus	PC:t	ARA	EST	ETB	PHT	S	SHC	UHC
LSI	1,2	--	-	---	---	-		---
	1,3	--	-	--	--	-	--	---
CF	1,2	-	--	---	--	--	-	---
	1,3	---	--	--	---	-	--	-
HB	1,2	++	+	++	+++	+		++
	1,3	++	++	+++	++	+	++	+
GROWTH	1,2	-	-	--	--	-		--
	1,3	--	--	---	-	---	--	-
HCT	1,2	+	+	++	+	+		++
	1,3	+	++	+++	+	++	++	
LCT	1,2		--	-		--	---	-
	1,3	-	--	---	-	---	--	-
MCHC	1,2	+++		++	+++	+		++
	1,3	++	+	++	++	+	++	+
EROD	1,2		--	-		--	---	-
	1,3	-			-			--
UDP	1,2		--	-		--	---	-
	1,3	---	--	--	---	-	--	-
GLYC	1,2			-		-	--	
	1,3	--	-	-	--		-	
LIPID	1,2		+++	++		+++	++	++
	1,3	+			++		+	+++

PCA:lla muodostetuilla viidellä ensimmäisellä pääkomponentilla tehtiin PC-regressio kroonisten kirjolohivaikutusten selittämiseksi yhdisteryhmi- en pitoisuusvaihtelulla (Liite 2). Tuloksena saatiin seuraavat ehdokkaat vaikuttaviksi ryhmiksi:

Vaikutus	Yhdisteryhmä	p
CF	inhibitio (-) esterit (EST)	.0231 *
	inhibitio (-) ftalaatit (PHT)	.0595 O
HB	inhibitio (-) aromaattiset hapot (ARA)	.0390 *
	stimulaatio (+) ftalaatit (PHT)	.0132 *
HCT	stimulaatio (+) esterit (EST)	.0821 O
	stimulaatio (+) etyylibentseeni (ETB)	.0222 *
	inhibitio (-) tyydyttyneet hiilivedyt (SHC)	.0287 *
MCHC	stimulaatio (+) ftalaatit (PHT)	.0271 *
UDP	inhibitio (-) esterit (EST)	.0224 *
GLYC	stimulaatio(+) esterit (EST)	.0174 *
	inhibitio (-) etyylibentseeni (ETB)	.0120 *
	stimulaatio (+) ftalaatit (PHT)	.0355 *
LIPID	stimulaatio (+) tyydyttymättömät hiilivedyt (UHC)	.0073 **

2.4.2 Yksittäisten yhdisteiden ja kalavaikutusten PCA

LSI-vaikutuksen kanssa korreloi 17 yhdistettä R:n itseisarvolla > 0.5 (Taulukko 10, Paasivirta ja Mikkelsen 1998). Näillä muodostettujen kahden ensimmäisen pääkomponentin BIPLLOT-projektio on esitetty kuvassa 9A. Siinä kuvatuista näytepistearvoista havaitaan, että LSI-efektit vaihtelevat suuresti eri näytevesien välillä. Muuttujalautausvektorit kertovat, että voimakkaasti korreloivat yhdisteet ovat yhtä lukuunottamatta mahdollisia LSI-inhibiittoreita. BIPLLOT-kuvauksen ja viiden pääkomponentin tarkastelun avulla (Liite 2: PC-arvot ja kolmen PC:n projektiio) valittiin 13 todennäköisintä vaikuuttajaa ja tehtiin niillä uusi pääkomponenttien muodostaminen ja viiden PC:n regressio. Regression tarkuutta esittää kuvan 9B SCATTERPLOT.



Kuva 9. A. Kahden ensimmäisen pääkomponentin BIPLLOT-esitys LSI-vaikutusarvojen ja 17 voimakkaasti korreloivan yhdisteen pitoisuuksien vaihtelusta.

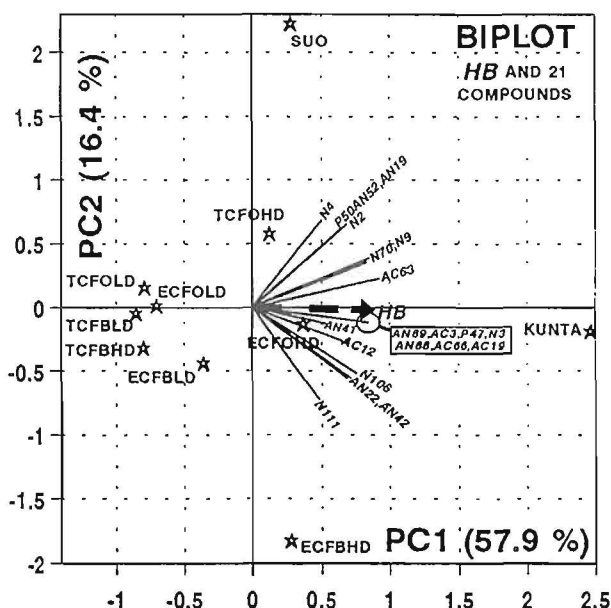
B. Scatterplot LSI:n ja 13 yhdisteen viidellä pääkomponentilla tehdystä poimivasta lineaarisesta PC-regressiosta.

Tuloksena edellä kuvatusta PCA:sta **LSI**-vaikuttajista todennäköisimmiksi saatiin:

Inhibiittoreiksi (-)	jokin ftalaatti (AC63)	$p = .0004$ ***
ja	tetrakosaani (AN78)	$p = .0002$ ***
Stimulantiksi (+)	haarautunut pentakosaani (N109AN79)	$p = .0041$ **

CF-kuntokertoimen kanssa ei yksikään yhdiste korreloinut merkitsevästi (p-arvot olivat > 0.01), mutta voimakkaasti ($|R| > 0.5$) korreloi 21 ainetta (Taulukko 10, Paasivirta ja Mikkelsen 1998). PCA:n avulla valittiin 10 todennäköisintä vaikuttajaa. PC-regressio osoitti, että niistä yksikään ei ollut merkitsevä, mutta kuitenkin **4-tridekanoni** (P12) oli jokseenkin merkitsevä ($p = 0.0422$) ehdokas inhibiittoriksi (Liite 2).

Myös **HB**-veriarvo korreloi voimakkaasti ($|R| > 0.5$) 21 yhdisteen kanssa. Näistä korrelaatioista kolme oli merkitseviä ($p < 0.01$; Taulukko 10, Paasivirta ja Mikkelsen 1998). BIPLLOT-kuvaus kahdella pääkomponentilla (Kuva 10) viittasi siihen, että kaikki merkitsevät vaikutukset olisivat positiivisia.



Kuva 10. Kahden ensimmäisen pääkomponentin BIPLLOT-esitys HB-vaikutusarvojen ja 21 voimakkaasti korreloivan yhdisteen pitoisuuksien vaihtelusta.

Kuitenkin, kun viisi pääkomponenttia 15 PC1:n ja PC2:n perusteella valitulla yhdisteellä ja HB:lla tehtynä otettiin poimivaan lineaariseen regressioon, merkitsevän positiiviseksi tuli vain yhden yhdisteen vaihtelu - kahdella muulla yhdisteellä oli PC-regression perusteella merkitsevä negatiivinen vaikutus. Regression lineaarisuus oli erinomainen. Tulostus (Liite 2) antoi seuraavat vaikuttajaehdokkaat:

Stimulaattori (+)	1,3-bis-metyleenisyklopentaani (N3)	$p = .0014^{**}$
Inhibiittorit (-)	bentsoehappo(AC19)	$p = .0031^{**}$
ja	1-metyyli-4-(1-metyylietyyli)-1,2-sykloheksaanidioli (N70)	$p = .0063^{**}$

Kirjolohen kasvun (GROWTH) kaikki korrelaatiot olivat ei-merkitseviä. Itseisarvolla $|R| > 0.4$ korreloi 50 yhdistettä, joista muodostetuista pääkomponenteista valittiin 18 todennäköistä vaikuttajaa, muodostettiin niillä uudet viisi ensimmäistä pääkomponenttia ja tehtiin poimiva lineaarinen monimuuttujaregressio (Liite 2). Regressio ei ollut merkitsevä ($p(F) = 0.1154$) ja yhtään merkitsevää selittäjää ei havaittu. Voimakkaimmat inhibiittoriehdokkaat olivat **eikosaani** (P50AN52, $p = 0.0835$ O) ja **heptaanihappo** (AC12, $p = 0.1916$ -). Stimulaattoriehdokkaista todennäköisin oli **2-metyyli-2-pentaanitioli** (N4, $p = 0.0925$ O).

Veriarvo HCT korreloi merkitsevästi tai voimakkaasti lukuisten yhdisteiden kanssa. PCA ja PC-regressio ($p(F) = 0.010$) tehtiin 18 yhdisteelle, joilla $|R| > 0.6$ (Liite 2). Merkitseviä stimulaattoriehdokkaita olivat **1,3-bis-metyleenisyklopentaani** (N3, $p = 0.0013$ **) ja **öljyhappo** (AC66, $p = 0.0082$ **), suuntaa antavan merkitsevä **heptakosaani** (AN88, $p = 0.0669$ O).

Veriarvolla LCT korrelaatiot olivat kaikki muut heikkoja ($|R| > 0.4$; taulukko 10, Paasivirta ja Mikkelsen 1998), paitsi stimulaattoriehdokkaalla **haarautunut pentakosaani** (N109An79; $|R| = 0.4956$; ei merkitsevä). Edellytykset PCA:n käyttöön puuttuivat.

Veriarvolle MCHC tehtiin PCA ja PC-regressio 15 yhdisteelle, joiden korrelaatio oli $|R| > 0.5$ (Liite 2). Todennäköisin stimulaattoriehdokas oli regression perusteella **1,3-bis-metyleenisyklopentaani** (N3, $p = 0.0261$ *) ja inhibiittori **jokin tiofeenijohdos** (AN31, $p = 0.0886$ O).

Maksaentsyymien EROD tason kanssa korreloi voimakkaasti ($|R| > 0.5$) vain kuusi yhdistettä. Niillä tehtiin sekä PC-regressio että alkuperäisten arvojen regressio (Liite 2). Kummallakin tavalla todennäköiseksi inhibiittoriksi tuli **isovoihappo** (2-metyylipropanihappo AC6): merkitsevyys oli vain suuntaa antava, PC-regressiossa $p = 0.0845$ ja alkuperäisten arvojen regressiossa $p = 0.0690$.

UDP-maksaentsyymien kanssa korreloi voimakkaasti ($|R| > 0.5$) 28 yhdistettä. Niiden PC-regressiolla (Liite 2) saatiin jokseenkin merkitseviksi inhibiittoreiksi **pentakosaani** (P70, $p = 0.0148$ *) ja **bentsotiatsoli** (N47AN3, $p = 0.0412$ *).

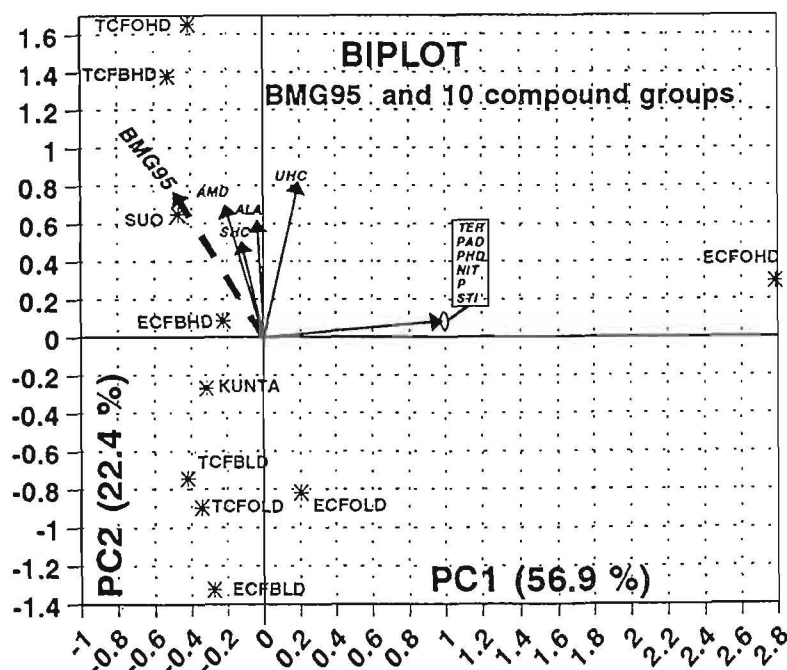
Maksan glykogeenin (GLYC) kanssa korreloi itseisarvolla $|R| > 0.5$ vain kolme yhdistettä (taulukko 10, Paasivirta ja Mikkelsen 1998). Aineet ovat inhibiittoriehdokkaita: **jokin ftalaatti** (N111, $R = -.6022$), **sykloheksaanijohdos** (N6, $R = -.5391$) ja **oktadieeni** (N9, $R = -.5274$). PCA ja PC-regressio eivät anna lisätietoa tällä aineistolla.

Maksan lipidipitoisuutta (LIPID) selitettiin 11 voimakkaasti ($|R| > 0.5$) korreloivan yhdisteen vaihtelun PCA:lla ja PC-regressiolla (Liite 2). Yhtään merkitsevää selittäjää ei havaittu. Todennäköisin stimulaattori oli regression perusteella **(asetyylidihydroksidimetyylibentsofura-nyyli)-pentaanidioni** (AN56, $p = 0.1396$ -).

2.5 Sinisimpukan kasvu

2.5.1 Kasvun ja yhdisteryhmien PCA

Sinisimpukan kasvu ensimmäisenä vuonna (BMG95) korreloi voimakkaasti ($|R| > 0.4$) kymmenen yhdisteryhmän kanssa. Näillä muuttujilla tehty PCA (Liite 3, Kuva 11) viittasi siihen, että amidit (AMD), tyydyttyneet hiilivedyt (SHC), alifaattiset karboksyylihapot (ALA) ja tyydyttymättömät hiilivedyt (UHC) erityisesti suovedessä ja väkevämmissä TCF-vesissä olisivat kasvun stimulaattoreita.

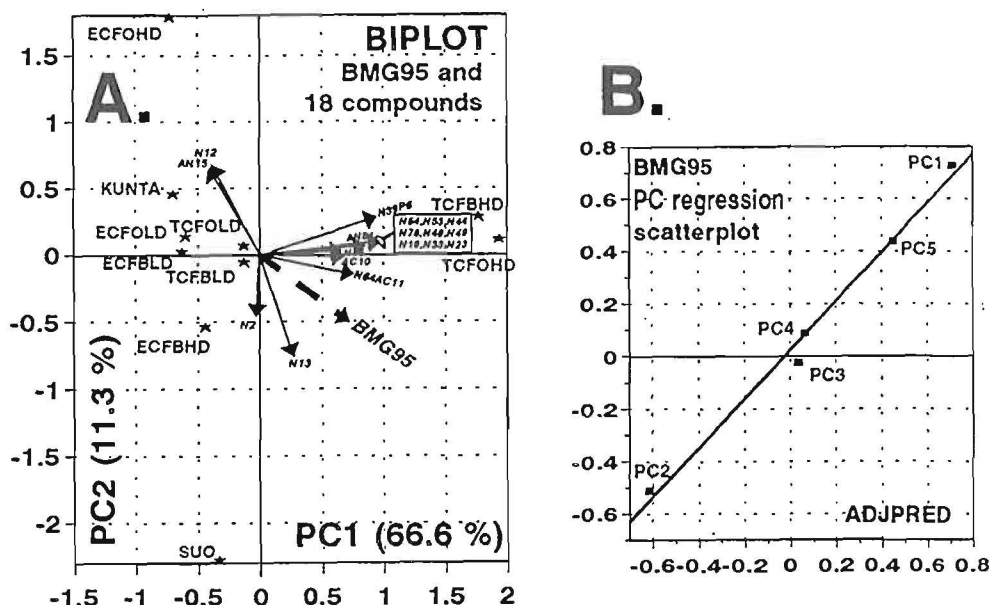


Kuva 11. Sinisimpukan kasvun BMG95 ja kymmenen yhdisteryhmän pitoisuuksien vaihtelun pääkomponenttiprojektio PC1/PC2-tasossa.

PC-regressio (Liite 3) osoitti **amidit** (AMD; $p = 0.0326 *$) ja **tyydyttyneet hiilivedyt** (SHC; $p = 0.0484 *$) jokseenkin merkitseviksi sinisimpukan ensimmäisen vuoden kasvun stimulaation selittäjiksi. **Tyydyttymättömille hiilivedyille** (UHC; $p = 0.0984 O$) indikoitui suuntaa antavan merkitsevä stimulaatiovaikutus.

2.5.2 Kasvun ja yksittäisten yhdisteiden vaihtelun PCA

Sinisimpukan ensimmäisen vuoden kasvun (BMG95) ja 18 voimakkaasti ($|R| > 0.5$) korreloivan yksittäisen yhdisteen PCA ja PC-regressio (Liite 3; Kuva 12) johtivat kolmen mahdollisen vaikuttajan havaitsemiseen.



Kuva 12. A. Kahden pääkomponentin BIPLLOT-esitys BMG95-vaikutusarvojen ja 18 yhdisteen pitoisuuksien vaihtelusta.
B. Scatterplot BMG95:n ja 18 yhdisteen viidellä pääkomponentilla tehdystä PC-regressiosta.

PC-regression perusteella jokseenkin merkitseviä **BMG95**:lle ovat:

Stimulaattorina (+)	tetradekaani (AN15)	$p = 0.0374 *$
Inhibiittoreina (-)	heksaanihappo (AC10)	$p = 0.0111 *$
ja	2,3-dimetyyli-2-syklopenteeni-1oni (N12)	$p = 0.0243 *$

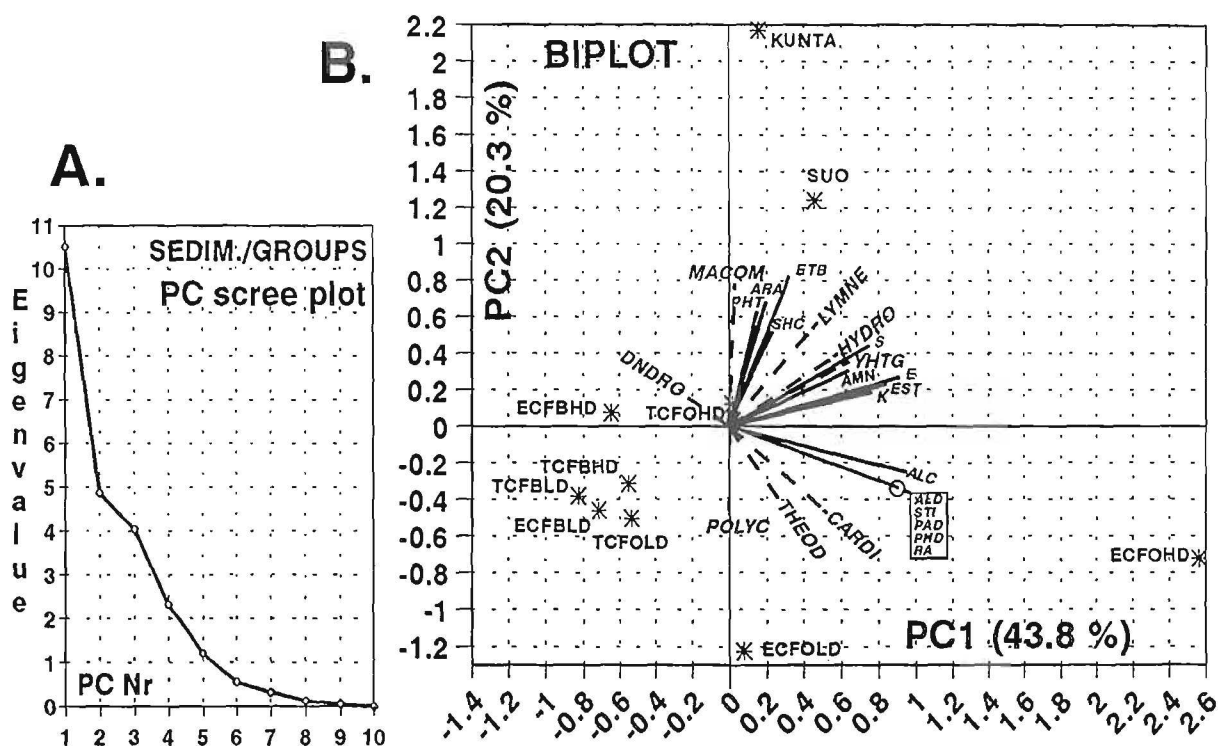
Toisen vuoden kasvun **BMG96** ja yhdisteiden korrelaatiot olivat niin heikkoja, että PCA ja PC-regressio eivät tuottaneet mitään tulosta.

Voimakkaita ($|R| > 0.5$; taulukko 14, Paasivirta ja Mikkelsen 1998) korrelaatioita havaittiin SBMORT:in kanssa vain neljällä, SBJUV95:n kanssa kahdella ja SBJUVG95:n kanssa kolmella yhdisteellä. Sen sijaan SBJUVG96 korreloi voimakkaasti 41 yhdisteen kanssa, mikä oikeutti tekemään PC-regression SBJUVG96:n selittämiseksi (Liite 4).

2.7 Sedimentin eliöiden biomassa

2.7.1 PCA yhdisteryhmien kanssa

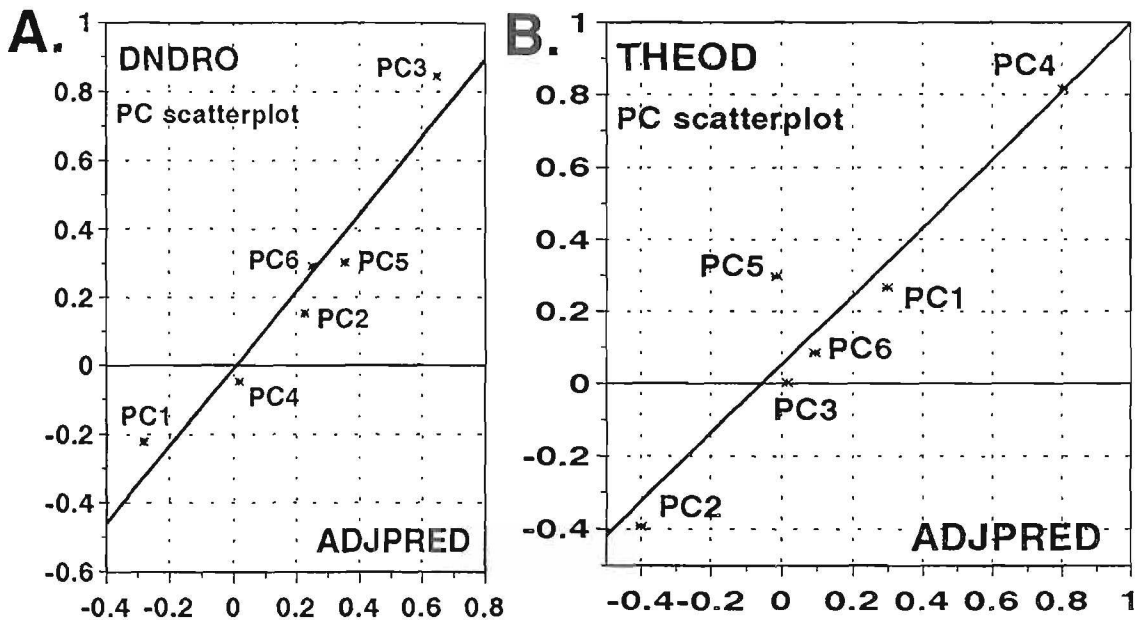
Voimakkaita ($|R| > 0.4$) korrelaatioita esiintyi kahdeksalla sedimentin biomassan kasvun arvolla yhteensä kuudentoista yhdisteryhmän kanssa (taulukko 17, Paasivirta ja Mikkelsen 1998). Näillä muuttujilla tehdyn PCA:lla (Liite 5) ominaisarvot olivat nolasta poikkeavia PC9 asti eikä niiden aleneminen ollut jyrkkää (Kuva 15 A). Tämä, kuten myös PC1/PC2-projektio (Kuva 15 B; 64.1 % vaihtelusta selitetty) osoitti vaihtelujen olevan kullakin eliölajilla hyvin erilaista.



Kuva 15. A. PC-ominaisarvojen ja pääkomponenttien SCREE-plotti.

B. BIPLLOT kahdeksan sedimenttivaikutuksen ja 16 yhdisteryhmän kahden ensimmäisen pääkomponentin arvoilla.

Poimiva monimuuttujaregressio (liite 5) kunkin vaikutuksen selittämiseksi yhdisteryhmillä tehtiin käyttäen muuttujina kuutta ensimmäistä pääkomponenttia. Regressio tuli F-arvon perusteella erittäin merkitseväksi ($p < .001$ ***) POLYC-efektillä, merkitseväksi ($p < .001$ **) vaikutuksilla LYMNE, CARDI ja THEOD sekä jokseenkin merkitseväksi ($P < 0.05$ *) efektillä DNDRO. Pari regressiosuoraa esitetään kuvassa 16.



Kuva 16. Suorat vaikutusten A. DNDRO ja B. THEOD selittämisestä kuuden ensimmäisen pääkomponentin poimivalla lineaarisella regressiolla.

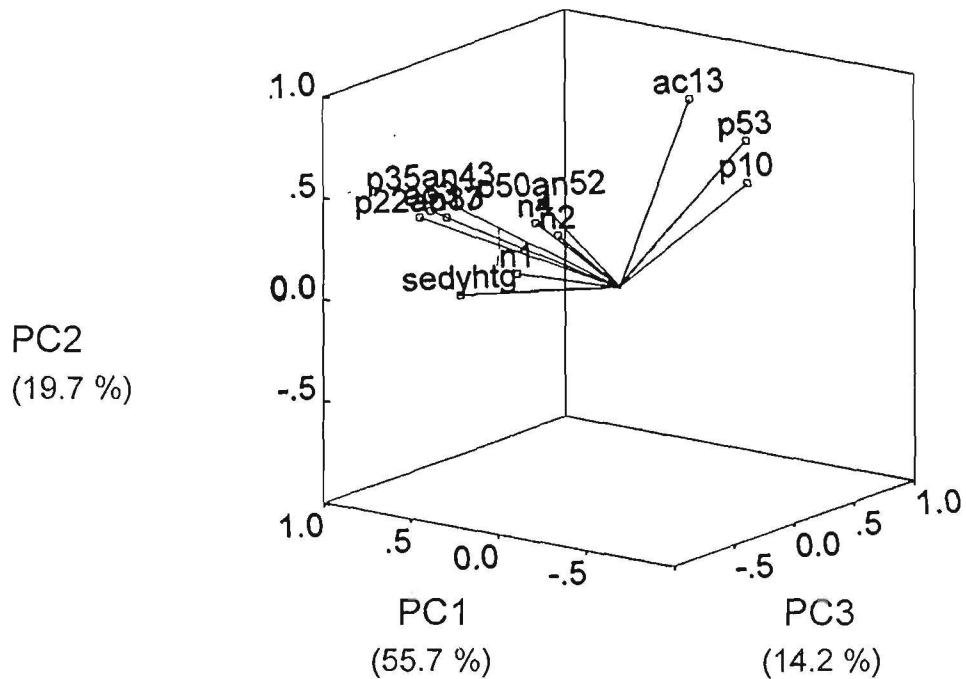
Regressioiden perusteella saatiin sedimentin eri eliölajien kasvulle seuraavat jokseenkin merkitsevät tai merkitsevät ehdokkaat vaikuttaviksi yhdisteryhmiksi:

DNDRO	inhibitio (-)	ftalaatit (PHT)	$p = .0327 *$
THEOD	inhibitio (-)	ftalaatit (PHT)	$p = .0033 **$
		ketonit (K)	$p = .0125 *$
		amiinit (AMN)	$p = .0351 *$
	stimulointi (+)	eetterit (E)	$p = .0226 *$
CARDI	inhibitio (-)	ftalaatit (PHT)	$p = .0030 **$
	stimulointi(+)	amiinit (AMN)	$p = .0142 *$
POLYC	inhibitio (-)	ftalaatit (PHT)	$p = .0002 ***$
	inhibitio (-)	esterit (EST)	$p = .0004 ***$
	inhibitio (-)	aromaattiset hapot (ARA)	$p = .0110 *$

2.7.2 Yksittäisten yhdisteiden ja sedimenttivaikutusten PCA

Kahdeksalle sedimenttivaikutukselle oli havaittu (taulukko 18, Paasivirta ja Mikkelsen 1998) voimakkaita ($|R| > 0.6$) korrelaatioita yksittäisten yhdisteiden kanssa. Yksi vaikutus kerrallaan pyrittiin selittämään PCA:lla ja PC-regressiolla yhdisteiden pitoisuusvaihtelun kanssa.

Sedimentin eliöiden biomassan yhteiskasvu YHTG korreloi voimakkaasti 11 yhdisteen vaihtelun kanssa. PCA:n (Liite 5) kolmen ensimmäisen pääkomponentin projektio (89.6 % vaihtelusta selitetty; Kuva 17) viittaa kolmeen inhibiittori- ja kahdeksaan stimulanttihakkeeseen.



Kuva 17. YHTG:n ja 11 yhdisteen PCA:n kolmen ensimmäisen pääkomponentin lataukset.

Viidellä ensimmäisellä pääkomponentilla tehty poimiva lineaarinen monimuuttujaregressio selitti meritsevästi ($F = 0.0075$ **) YHTG:n vaihtelun (Liite 5). Vaikuttajaehdokkaiksi tulivat:

inhibiittoriksi (-)	palmitiinihappo (P53)	p = .0083 **
ja	oktadekaani (P35AN43)	p = .0313 *
stimulantiksi (+)	dimetyyliheksaanihappo (AC13)	p = .0105 *

MACOM, sedimentin itämerensimpukan kasvu, korreloi voimakkaasti yhtentoista yhdisteen kanssa, jotka PCA:n perusteella olivat lähinnä stimulaattoriehdokkaita (Liite 5). Regressio tuli merkitseväksi ($F = 0.0003$ ***) yhdellä selittäjällä, joka oli stimulaattoriehdokas **1,3-bis-metyleenisyyklopentaani (N3; p = 0.0003 ***)**.

Sedimentin *Lymnea*:n kasvun kanssa voimakkaasti ($|R| > 0.6$) korreloivan 21 yhdisteen PCA ja PC-regressio (Liite 5) tuottivat vain yhden merkitsevän stimulaattoriehdokkaan, **2-metyyli-2-pentaanitiolin** (N4; $p = .0043^{**}$).

*Cardium*in kasvun ($|R| > 0.6$) n kanssa esiintyi vain kolme yli $|R| > 0.6$ korrelaatiota. PCA-käsittely tehtiin sen vuoksi 35 yhdisteellä, joiden korrelaatiot CARDI:n kanssa olivat yli $|R| > 0.5$ (Liite 5). Vain yksi jokseenkin merkitsevä vaikuttaja havaittiin PC-regressiolla: inhibiittoriehdokas **jokin ftalaatti** (P71AN80, $p = .0148^{*}$).

*Dendrocoleum*in kasvu korreloi voimakkaasti ($|R| > 0.6$) 13 aineen vaihtelun kanssa. PC-regressio näillä muuttujilla (Liite 5) tuotti yhden jokseenkin merkitsevän inhibiittoriehdokkaan, **butyylisykloheksaanin** (N13 $p = .0115^{*}$).

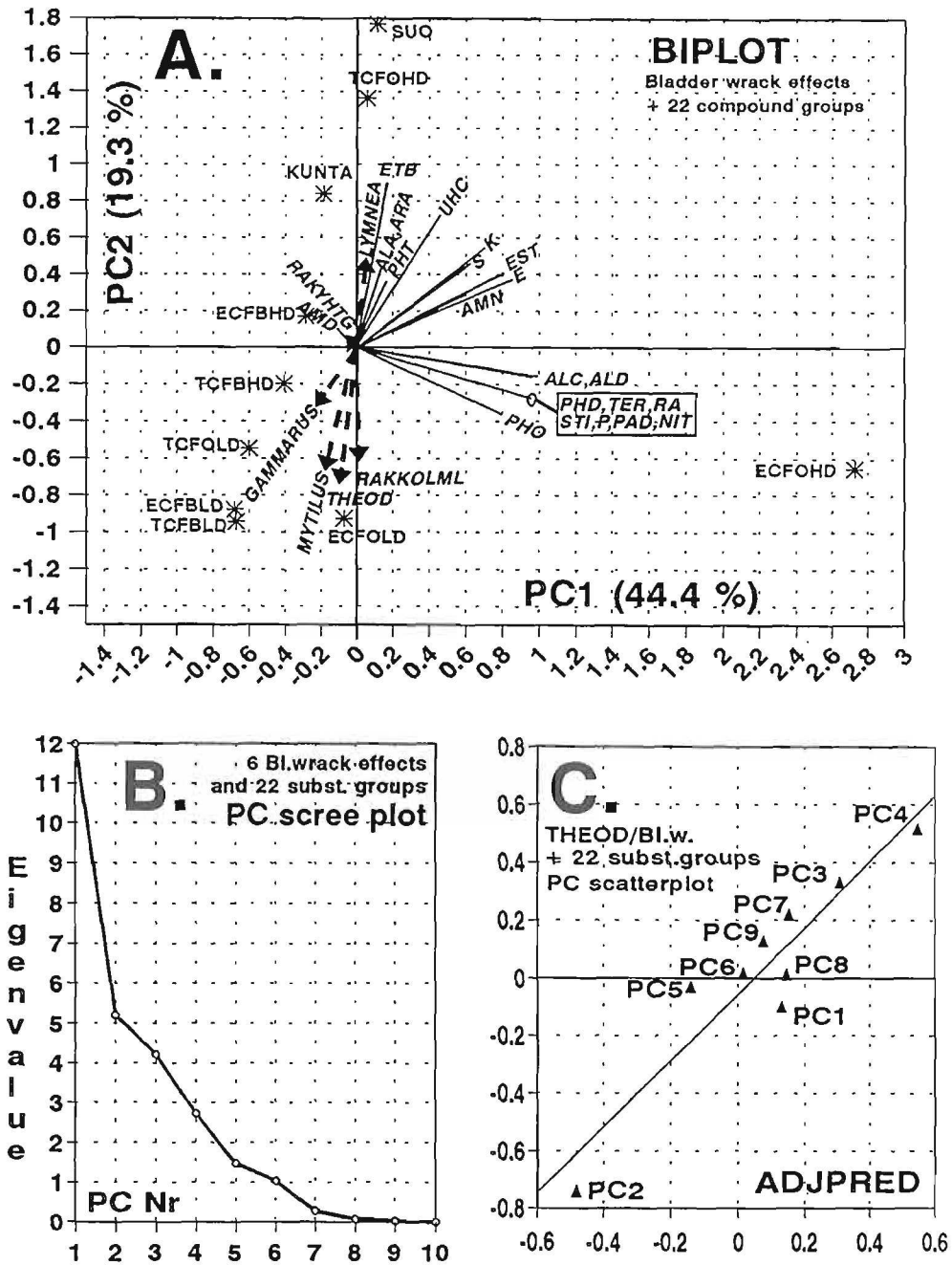
Sedimentin *Hydrobia* kasvu korreloi voimakkaasti ($|R| > 0.6$) 16 yhdisteen kanssa. PC-regression (Liite 5) mukaan jokseenkin merkitseviä vaikuttajia olivat stimulanttiehdokkaina **öljyhappo** (AC66, $p = .0207^{*}$) sekä **heptakosaani** (AN88, $p = .0415^{*}$).

Sedimentin *Theodoxuksen* ja *Polychaetan* kasvuille havaittiin vain yksi $|R| > 0.4$ Pearson-korrelaatio, kummallekin samalla aineella, **haarautuneella pentakosaanilla** (N109AN79). Kertoimien positiiviset arvot olivat THEOD:lla $R = 0.6364^{*}$ ja POLYC:lla $R = 0.5375$. PCA-käsittely oli turha.

2.8 Rakkolevän eliöyhteisön biomassa

2.8.1 Yhdisteryhmien PCA

Rakkolevän eliöyhteisön blomassavaikutuksilla esiintyi kahdeksan jokseenkin merkitsevää ja muutamia muita $|R| > 0.5$ korrelaatioita yhdisteryhmien pitoisuuksien kanssa (Taulukko 21, Paasivirta ja Mikkelsen 1998). Tästä huolimatta kokeiltiin vaikutusten selittämistä PCA:lla kaikkien 22 yhdisteryhmän pitoisuuksien vaihtelulla näytteissä (Liite 6). Nollasta poikkeavia pääkomponentteja tuli yhdeksän. Näillä kaikilla PC:lla tehtiin poimiva lineaarinen regressio erikseen kullekin vaikutukselle. Graafisia kuvauksia tuloksista esitetään kuvassa 18.



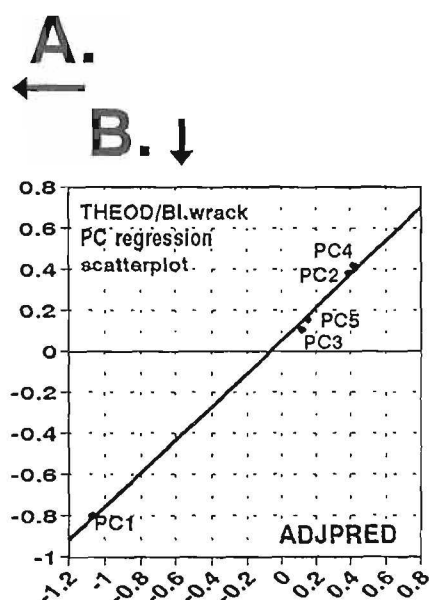
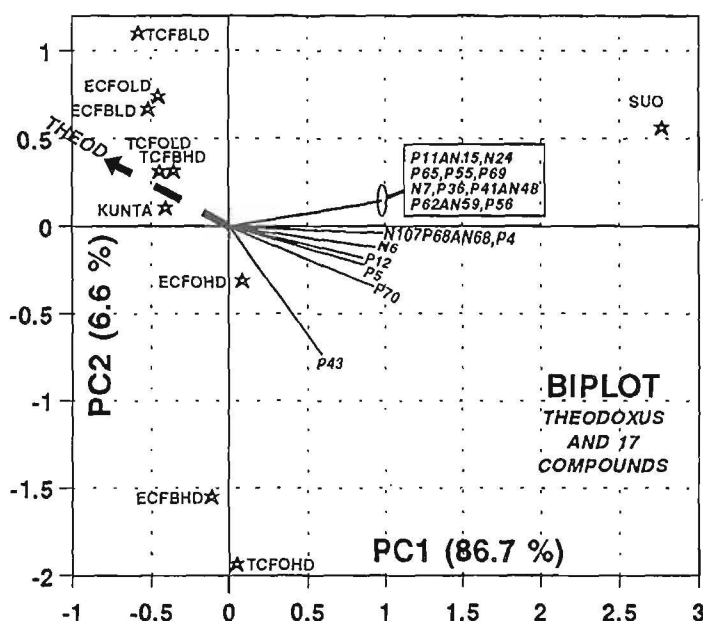
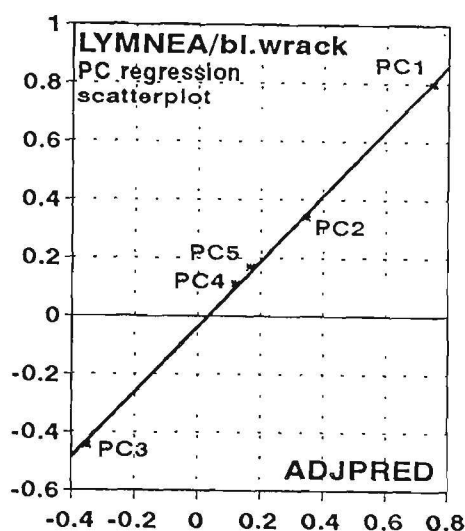
Kuva 18. A. Biplot-projektio rakkolevän eliöyhteisön kuuden vaikutuksen ja 22 yhdisteryhmän vahtelusta PC1/PC2-tasossa.
B. Kymmenen ensimmäisen PC:n ominaisarvodiagrammi.
C. Regressiosuora rakkolevän *Theodoxus*:en kasvuvaikutuksen selittämisestä yhdeksän PC:n avulla.

Poimiva monimuuttujaregressio (Liite 6) tuotti vain harvoja merkitseviä ehdokkaita vaikuttaviksi yhdisteryhmiksi. PC-regression perusteella *Mytiluksen* kasvua inhiboi **etylibentseeni** ($p = .0317^*$).

Rakkolevän *Lymnean* biomassa korreloi voimakkaasti ($|R| > 0.6$) 17 yksittäisen yhdisteen pitoisuuksien kanssa. Näillä muuttujilla tehty PCA antoi merkitsevän regressiotuloksen (Liite 6, Kuva 20), minkä mukaan vaikuttajaehdokkaiksi saatiin:

Inhibiittori (-) pentaanihappo (AC8) $p = .0030^{**}$
ja (asetyyli-dihydroksi-dimetyyli-
bentsofuranyyli)-pentaanidioni (P56) $p = .0234^{*}$
Stimulantti (+) eikosaani (P50AN52) $p = .0056^{**}$

Kuva 20.
Regressiosuora
rakkolevän
Lymnean kasvun
selittämisestä 17
yhdisteen pitoi-
suuksilla viiden
pääkomponentin
avulla.



Kuva 21. A. Biplot-projektio rakkolevän *Theodoksuksen* (THEOD) ja 17 yhdisteen vaihtelusta PC1/PC2-tasossa.
B. Regressiosuora rakkolevän THEOD:in selittämisestä 17 yhdisteen vaihtelun kanssa tehdyn viiden PC:n avulla.

Theodoxuksen kasvun kanssa korreloi voimakkaasti 17 yhdistettä. PCA näillä johti merkitsevään regressiotulokseen (Liite 6, kuva 21), jonka mukaan ehdokkaita inhibiittoreiksi ovat **4-tridekanoni** (P12, $p = .0045^{**}$) sekä **(asetyyli-dihydroksi-dimetyyli-bentsofuranyyli)-pen-taani-dioni** (P56, $p = .0096^{**}$).

Gammarus korreloi heikosti lähes kaikkien aineiden kanssa. Vain kahdeksalla yhdisteellä oli $|R| > 0.5$. Niillä tehty PCA ja PC-regressio (Liite 6) ehdotti jokseenkin merkitseviksi inhibiittoreiksi **pentadekeeniä I** (P15, $p = .0436^{*}$) sekä **(asetyyli-dihydroksi-dimetyyli-bentso-furanyyli)-pentaanidionia** (P56, $p = .0493^{*}$).

Rakkolevän eliöyhteisön kokonaisbiomassan (RAKYHTG) kanssa korreloi kertoimella $|R| > 0.6$ kuusitoista yhdistettä (Taulukko 22, Paasivirta ja Mikkelsen 1998). Näillä muuttujilla tehty PCA ja PC-regressio (Liite 6, Kuva 22) ehdotti merkitseviksi vaikuttajiksi kolmea ainetta:

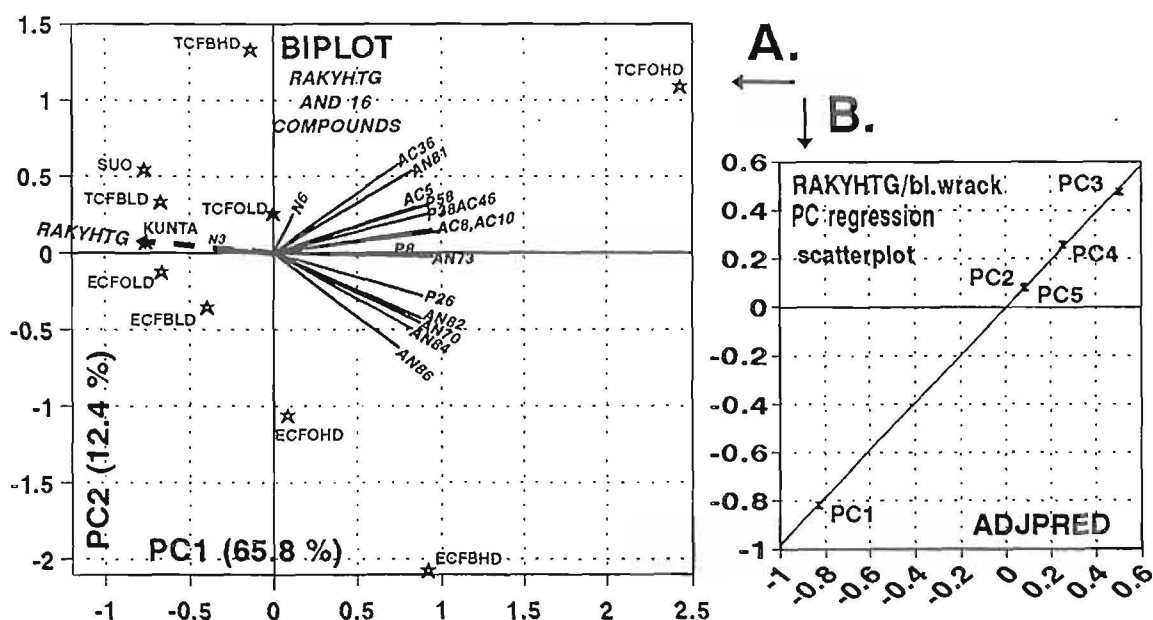
Inhibiittori (-) heksaanihappo (AC10)

$p = .0008^{***}$

ja heksakosaanijohdos

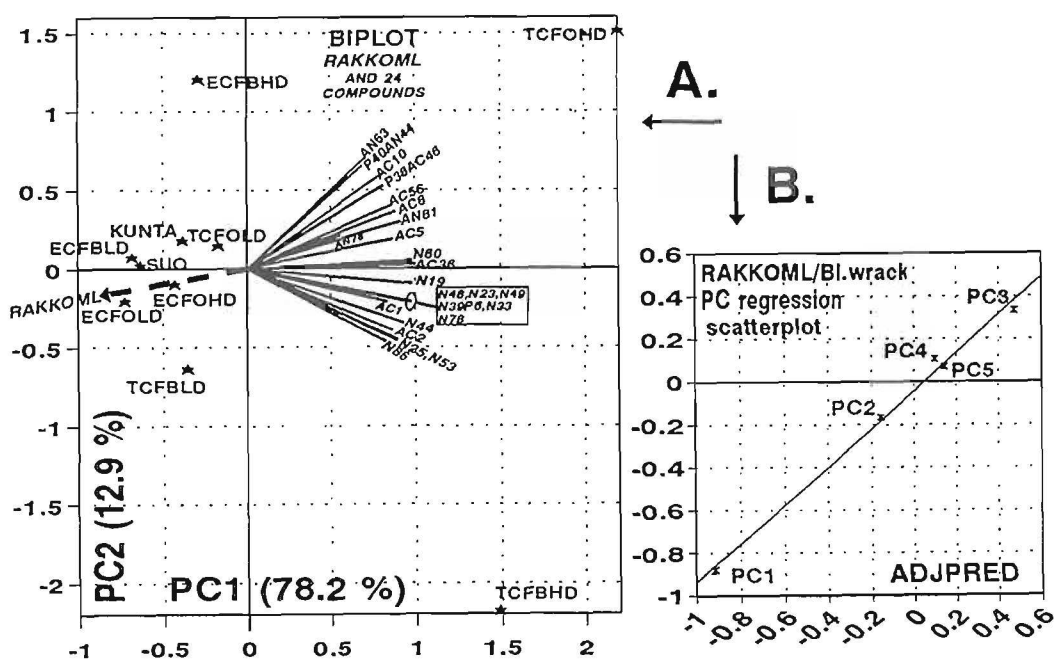
$p = .0311^{*}$

Stimulantti (+) 1,3-bis-metyleenisyklopentaani (N3) $p = .0013^{**}$



Kuva 22. A. Rakkolevän eliöyhteisön kokonaisbiomassan ja 16 yhdisteen PCA BIPLLOT-projektiona PC1/PC2-tasossa. B. Edellisen PCA:n viidellä ensimmäisellä pääkomponentilla RAKYHTG:n selittämiseksi tehdyn PC-regression SCATTERPLOT-suora.

Itse rakkolevän kasvussa oli mesokosmoskokeissa eri näytteillä havaittu varsin suuria eroja. Herkkyys lukuisille kemikaaleille oli ilmeistä: peräti 69 yhdistettä korreloi kokonaisbiomassan (RAKKOML) kanssa kertoimella $|R| > 0.6$ (Taulukko 22, Paasivirta ja Mikkelsen 1998). Merkitsevimpiä vaikuttajaehdokkaita haettiin (Liite 6) PCA:lla 24 yhdisteen joukosta, joiden pitoisuusvaihtelun korrelaatio RAKKOML:n kanssa oli $|R| > 0.7$. Kahden ensimmäisen pääkomponentin BILOT ja viidellä PC:llä tehdyn poimivan monimuuttujaregression SCATTERPLOT esitetään kuvassa 23.



Kuva 23. A. Rakkolevän ja sen eliöyhteisön biomassasumman RAKKOML sekä 24 yhdisteen PCA BILOT-projektiona PC1/PC2-tasossa.

B. Edellisen PCA:n viidellä ensimmäisellä pääkomponentilla RAKKOML:n selittämiseksi tehdyn PC-regression SCATTERPLOT-suora.

Poimiva monimuuttujaregressio tuotti vain kaksi merkitsevää vaikuttajaa RAKKOML:le (Liite 6). Nämä yhdisteet olivat:

Inhibiittori (-)	tetrakosaani (AN78)	p = .0031 **
ja	pentakosaanijohdos (AN81)	p = .0016 **

3. YHTEENVETO

3.1 Akuuttimyrkyllisyyden vaikuttajat

Yhdisteryhmistä vain alifaattiset karboksyylihapot (ALA) korreloivat merkitsevästi akuuttimyrkkyvaikutusten LBACT (valobakteeritesti) ja ALGAE (levänkasvun esto) kanssa (Paasivirta ja Mikkelsen 1998). PCA ehdotti merkitseväksi (+)**-vaikuttajaksi (myrkyksi) vain ALA-ryhmää LBACT-efektille ylivoimaisesti vaikuttavimman näytteen ollessa TCFO (käsittelemätön TCOF-valkaisun päästövesi). Merkitseväksi (-)**-vaikuttajaksi (vastamyrkyksi) PC-regressio ehdotti vain rikkiyhdisteitä (S).

Yksittäisistä yhdisteistä PCA ja PC-regressio poimi lukuisia merkitseviä vaikuttajaehdokkaita (Taulukko 2), myös mitokondriovaikutukselle (MITOK).

TAULUKKO 2. PC-regressiolla havaitut merkitsevät akuuttivaikuttajat ja näytteet, joissa ainetta on eniten (pitoisuusjärjestyksessä, suurimman pitoisuuden näyte ensimmäisenä).

Koodi	Yhdiste	Vaikutus	Näytteet
Myrkky (+)			
AC5	voihappo	ALGAE**	TCFO, ECFO
AC12	heptaanihappo	ALGAE**	ECFO, ECFB
AC13	dimetyyliheksaanihappo	MITOK**	TCFO
AC36	dodekaanihappo	ALGAE**	TCFO, TCFB
AC58	heptadekaanihappo	LBACT***	TCFO
P74AN58	heksakosaani	MITOK**	ECFO, ECFB
P8	heptenyylisykloheksaani	LBACT***	TCFO, ECFB
Vastamyrkky (-)			
AC51	pentadekaanihappo	ALGAE**	ECFO
N70	1-metyyli-4-(1-metyylietyyli)- 1,2-sykloheksaanidioli	MITOK**	KUNTA, SUO
P50AN52	eikosaani	ALGAE**	SUO, KUNTA
P58	haarautunut eikosaani	LBACT***	TCFO

Jokseenkin merkitseväksi ($p = 0.0194$ *) vaikuttajaksi tuli PC-regression mukaan jokin ftalaatti (N86) myrkkynä (+) ALGAE-efektille.

3.2 Kroonisten mesokosmosvaikutusten aiheuttajat

Yhteenveto **yhdisteryhmistä**, joille PC-regressio ehdotti jotakin merkitsevää mesokosmosefektiä on taulukossa 3.

TAULUKKO 3. PC-regressiolla havaitut mesokosmokseen merkitsevästi vaikuttavat yhdisteryhmät ja niitä eniten sisältävät näytteet (pitoisuusjärjestyksessä).

Koodi	Yhdisteryhmä	Vaikutus	Näytteet
Inhibiittori (-)			
ALA	alifaattiset karboksyylihapot	RAKYHTG**	TCFO,ECFO
ALD	aldehydit	RAKLYMNE**	ECFO,TCFO
AMD	amidit	RAKKOML**	TCFB,TCFO
K	ketonit	RAKTHEOD***	SUO,ECFO
EST	esterit	SEDPOLYC***	ECFO,SUO
PHO	fosfaatit	RAKTHEOD**	ECFO,TCFO
PHT	ftalaatit	SEDCARDI**	KUNTA,ECFB
		SEDPOLYC***	
		SEDTHEOD**	
UHC	tydyttymättömät hiilivedyt	RAKKOML**	TCFO,ECFO
Stimulantti (+)			
ALC	alkoholit	RAKTHEOD***	ECFO,SUO
S	rikkiyhdisteet	RAKLYMNE**	SUO,ECFO
UHC	tydyttymättömät hiilivedyt	LIPID**	TCFO,ECFO

Yksittäisten yhdisteiden joukon merkitsevät ($p < 0.01$) vaikuttajaehdokkaat on koottu taulukkoon 4. Muita yhdisteitä PCA ja PC-regressio ehdottivat vaikuttajiksi vain jokseenkin merkitsevästi ($p < 0.05$ *) tai suuntaa antavalla merkitsevyydellä ($p < 0.1$ O). Nämä ehdokkaat on esitetty luvuissa 2.4. - 2.8 eri vaikutusten PCA-kuvausten yhteydessä.

TAULUKKO 4. PC-regressiolla havaitut merkitsevät mesokosmosvaikutajat ja näytteet, joissa ao. ainetta on eniten (pitoisuusjärjestyksessä).

Koodi	Yhdiste	Vaikutus	Näytteet
Inhibiittori (-)			
AC8	pentaanihappo	RAKLYMNE**	TCFO,ECFB
AC10	heksaanihappo	RAKYHTG***	TCFO,ECFB
AC19	bentsoehappo	HB**	KUNTA,TCFO
AC63	jokin ftalaatti	LSI***	KUNTA,SUO
AN78	tetrakosaani	LSI***	ECFB,TCF
		RAKKOML**	
AN81	pentakosaanijohdos	RAKKOML**	TCFO,TCFB
N70	1-metyyli-4-(1-metyylietyyli)- sykloheksaanidioli	HB**	KUNTA,TCFO
P12	4-tridekanoni	RAKTHEOD**	SUO,ECFB
P53	palmitiinihappo	SEDYHTG**	ECFB,TCFB
P56	(asetyyli-dihydroksi- dimetyyli-bentsofura- nyyli)-pentaanidioni	RAKTHEOD**	SUO,TCFO
Stimulantti (+)			
AC12	heptaanihappo	HCT**	ECFO,KUNTA
N3	1,3-bis-metyleen- syklopentaani	HB**	KUNTA,ECFB
		HCT**	
		SEDMACOM***	
		RAKYHTG**	
N4	2-metyyli-2-pentaanitioli	SEDLYMNE**	SUO,ECFO
N109AN79	haarautunut pentakosaani	LSI**	ECFO,TCFO
P50AN52	eikosaani	RAKLYMNE**	SUO,KUNTA

Poimiva lineaarinen monimuuttujaregressio tehtiin muutamissa tapauksissa voimakkaasti korreloiville aineille myös selitettävän vaikutuksen ja pitoisuuksien alkuperäisillä arvoilla (esimerkit liitteissä 2 ja 6). Tulokset ehdottivat samoja aineita vaikuttajiksi kuin samoilla muuttujilla tehty PC-regressio, joskin jälkimmäinen antoi ehdokkaita yleensä paremmalla merkitsevyydellä.

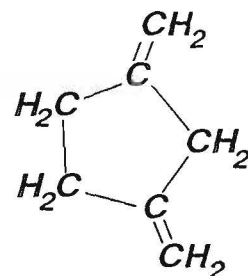
3.3 Pohdintaa ja johtopäätöksiä

Useille mesokosmosvaikutuksille ei PC-regressiolla saatu yhtään merkitsevää vaikuttajaa, vaikka varsin monet yhdisteet korreloivat voimakkaasti eri efektien lukuarvojen kanssa. Yhdisteiden keskinäinen korrelaatio selittää voimakkaiden korrelaatioiden suuren lukumäärän, mutta PC-regressiolla tämän häiriön pitäisi ainakin jossakin määrin eliminoida (Jolliffe 1986). Mahdollisuuksia useamman vaikuttajan löytämiseen rajoitti näytteiden pieni lukumäärä: kymmenen, joista tehdasvesinäytteet olivat neljän alkuperäisen LD-HD-laimennuspareja (akuuttitoksisuustesteissä oli vain kuusi näytettä).

Merkitseviksi todetut vaikuttajat ovat yleensä tunnettuja aineita, joista malliaineet toksisuusvertailuja ym. jatkotutkimuksia varten ovat kaupallisesti saatavissa. Seuraavien kolmen yhdisteen malliaineiden saanti vaatii synteesiä:

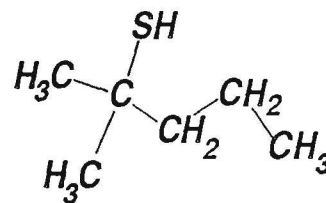
N3; 1,3-bis-metyleenisyklopentaani C_7H_{10}

CAS 20968-70-1. Runsas kunta- ja kuorimovesissä, tehdasvesistä havaittiin vain ECFB:ssä $0.79 \mu\text{g/L}$. Ilmeinen luonnonaine: terpeenien hajoamistuote. Kirjallisuutta runsaasti.



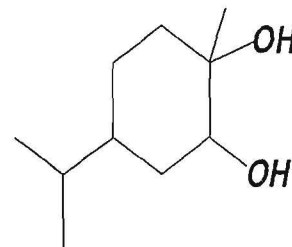
N4; 2-metyyli-2-pentaanitioli $C_6H_{14}S$

CAS 1633-97-2. Runsas suo-, kuorimo-, kunta- ja ECFO-vesissä. Luonnonaineiden, erityisesti proteiinien, biohajoamistuote. Havaittu esim. bakteeritoiminnan tuotteena lihasta (Itarapichet ja Bailey 1992).



N70; 1-metyyli-4-(1-metyylietyyli)-sykloheksaanidioli

CAS 33669-76-0 ja 1612-98-2; kolme puhdasta enantiomeeria myös tunnettu. Terpeenien, esim. Δ^1 -menteenin hapettumistuote. Identifioitu varsin monista eteerisistä öljyistä.



Yhden yhdisteen, SUO- ja TCFO-vesistä havaitun (asetyyli-dihydroksidimetyyli-bentsofuranyyli)-pentaanidionin (P56) malliaineen tekeminen vaatii ensin rakenteen tarkempaa määrittystä.

4. KIRJALLISUUSLUETTELO

- Ahtiainen, J., M. Ruoppa, T. Nakari ja M. Verta (1997). Toxicity screening of novel pulping influents and effluents treated in activated sludge plants. *3rd International Conference on Environmental Fate and Effects of Pulp and Paper Mill Effluents*, Rotorua, New Zealand 9-13 November 1997. Conference Preprints. Pp. 119-123.
- Itarapichet, K. ja M. E. Bailey (1992). *Thai J. Agric. Sci.* **25**: 299-326.
- CA 122 (1995) 30110r.
- Jolliffe, I. T. (1986). *Principal Component Analysis*. Springer-Verlag New York, USA.
- Lehtinen, K.-J., J. Tana., K. Mattson, C. Engström, M. Lagus, J. Ahtiainen ja T. Nakari (1998). Vaikutukset ekosysteemin toimintaan ja rakenteeseen. Kirjassa: *Happikemikaalien käyttöön perustuvan massanvalkaisun ympäristövaikutuksia: Vaiheen II malliekosysteemitutkimukset*. Suomen ympäristö **195**.
- Mikkelsen, P. ja J. Paasivirta (1998). *Happikemikaalien käyttöön perustuvan massanvalkaisun ympäristövaikutuksia: Orgaanisten yhdisteiden kemiallinen karakterisointi ja korrelaatiot*. Suomen ympäristökeskuksen moniste **111**.
- Mikkelsen, P. ja J. Paasivirta (1997). Chemical characterization of total wastewaters from pine pulp mill process with TCF or ECF bleaching. *3rd International Conference on Environmental Fate and Effects of Pulp and Paper Mill Effluents*, Rotorua, New Zealand 9-13 November 1997. Conference Preprints. Pp. 105-113.
- Paasivirta, J. and P. Mikkelsen (1997). Oxygen and ECF bleaching waste compounds and their contribution to ecotoxic effects *3rd International Conference on Environmental Fate and Effects of Pulp and Paper Mill Effluents*, Rotorua, New Zealand 9-13 November 1997. Conference Preprints. Pp. 95-104.
- Ruonala, S. ja R. Lammi (1997). Environmental impacts of pulp bleaching based on oxygen chemicals. *3rd International Conference on Environmental Fate and Effects of Pulp and Paper Mill Effluents*, Rotorua, New Zealand 9-13 November 1997. Conference Preprints. Pp. 79-86.
- Tana, J., K.-J. Lehtinen, T. Nakari, K. Mattson, C. Engström ja M. Lagus (1998). Vaikutukset kalojen fysiologiaan - kirjolohjaltistus. Kirjassa: *Happikemikaalien käyttöön perustuvan massanvalkaisun ympäristövaikutuksia. Vaiheen II malliekosysteemitutkimukset*. Suomen ympäristö **195**.
- Tana, J., K.-J. Lehtinen, K. Mattson ja C. Engström (1997). Effects in mesocosms exposed to bleach plant effluents from ECF and TCF kraft pulp production. *3rd International Conference on Environmental Fate and Effects of Pulp and Paper Mill Effluents*, Rotorua, New Zealand 9-13 November 1997. Conference Preprints. Pp. 423-431.

LIITE 1.

Akuuttivaikutusten ja aineiden monimuuttuja-analyysi.

SUBSTANCE GROUPS

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

Variable	Communality		PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
ALA	1.00000	*	1	11.62487	52.8	52.8
ALC	1.00000	*	2	3.87528	17.6	70.5
ALD	1.00000	*	3	3.50754	15.9	86.4
AMD	1.00000	*	4	2.46839	11.2	97.6
AMN	1.00000	*	5	.52392	2.4	100.0
ARA	1.00000	*	6	.00000	.0	100.0
E	1.00000	*	7	.00000	.0	100.0
EST	1.00000	*	8	.00000	.0	100.0

PC extracted 2 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa		PC1loa
ALC	.99656	.05369		.99656
P	.99131	-.08242		.99131
PAD	.99013	-.09215		.99013
STI	.98848	-.09332		.98848
RA	.98677	-.12781		.98677
TER	.98484	-.06643		.98484
NIT	.97482	-.12272		.97482
ALD	.97436	-.19199		.97436
PHD	.96762	-.14879		.96762
E	.79311	.09025		.79311
PHO	.78124	-.21907		.78124
EST	.74221	.64856		.74221
AMN	.49783	-.42269		.49783
UHC	.31144	-.24219		.31144
SHC	-.17366	.92978		-.17366
S	.50470	.79677		.50470
K	.59622	.65138		.59622
ETB	-.14972	.64481		-.14972
ARA	-.11994	-.48354		-.11994
ALA	-.01123	-.43376		-.01123
PHT	-.18593	-.39535		-.18593
AMD	-.25521	-.34907		-.25521
SUO	-.23683		2.00526	-.11721
KUNTA	-.45225		-.34213	-.22383
TCFO	-.23712		-.68621	-.11736
TCFB	-.57919		-.30806	-.28666
ECFO	2.02049		-.14414	1.00000
ECFB	-.51510		-.52472	-.25494
Sample	PC1sco		PC2sco	PC1SCON
				PC2SCON

ACUTE EFFECTS AND SUBSTANCE GROUPS

Principal components analysis

PC extracted 2 factors.

Factor Matrix:

	PC1	PC21oa	PC2sco
ALC	.99794	-.05021	
P	.99339	.01365	
PAD	.99232	.02160	
STI	.99210	.00113	
TER	.98625	-.00004	
RA	.98599	.09545	
NIT	.98156	-.02514	
PHD	.97508	-.00122	
ALD	.97125	.21104	
PHO	.79249	-.12269	
E	.77351	.29964	
EST	.74559	-.42266	
K	.57942	-.04363	
S	.50304	-.49875	
MITOKOND	.30066	-.28626	
ETB	-.16706	-.07746	
ALA	-.04141	.93366	
LBACT	-.09179	.90711	
ALGAE	-.11218	.90474	
UHC	.27918	.81072	
AMN	.47494	.65492	
SHC	-.17844	-.57996	
AMD	-.27454	.46247	
ARA	-.12864	.40659	
PHT	-.16121	-.20175	
SUO	-.11903		-.60903
KUNTA	-.22638		.02117
TCFO	-.14864		1.00000
TCFB	-.28702		-.07537
ECFO	1.00000		-.01183
ECFB	-.21892		-.32493
Sample	PC1SCN		PC2SCN

ALGAE and 74 strongly correlating
($|R| > 0.5$) compounds

Sample ALGAE

SUO	1.00
KUNTA	2.50
TCFO	9.09
TCFB	5.88
ECFO	3.33
ECFB	2.00

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

Variable	Communality	*	PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
ALGAE	1.00000	*	1	54.58264	72.8	72.8
AC1	1.00000	*	2	11.08954	14.8	87.6
AC10	1.00000	*	3	4.71068	6.3	93.8
AC12	1.00000	*	4	2.96787	4.0	97.8
AC14	1.00000	*	5	1.64926	2.2	100.0
AC18	1.00000	*	6	.00000	.0	100.0
AC2	1.00000	*	7	.00000	.0	100.0
AC22	1.00000	*	8	.00000	.0	100.0

PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC11oa	PC21oa	PC31oa	PC41oa	PC51oa
AN81	.99244	-.08378	.08922	-.00106	.00875
AC56	.98862	.02551	-.00212	-.07028	.13048
N21	.98360	.14850	.10101	-.00688	.01526
AC14	.97964	.19773	-.01313	-.00794	-.03118
AC18	.97956	.18487	-.01002	-.04338	-.06562
AC24	.97949	.20082	-.00600	-.00215	-.01511
N81	.97899	.20283	.01650	-.00239	.01266
AC26	.97899	.20283	.01650	-.00239	.01266
AN13	.97899	.20283	.01650	-.00239	.01266
P34	.97899	.20283	.01650	-.00239	.01266
N83	.97899	.20283	.01650	-.00239	.01266
AC32	.97899	.20283	.01650	-.00239	.01266
AC50	.97899	.20283	.01650	-.00239	.01266
AC52	.97899	.20283	.01650	-.00239	.01266
AC54	.97899	.20283	.01650	-.00239	.01266
N65	.97899	.20283	.01650	-.00239	.01266
AC37	.97899	.20283	.01650	-.00239	.01266
N80	.97899	.20283	.01650	-.00239	.01266
AC42	.97899	.20283	.01650	-.00239	.01266
AC67	.97899	.20283	.01650	-.00239	.01266
AN30	.97899	.20283	.01650	-.00239	.01266
AC45	.97899	.20283	.01650	-.00239	.01266
P30	.97899	.20283	.01650	-.00239	.01266
AC22	.97899	.20283	.01650	-.00239	.01266
N34	.97899	.20283	.01650	-.00239	.01266
P27	.97899	.20283	.01650	-.00239	.01266
AN21	.97899	.20283	.01650	-.00239	.01266
AN37	.97899	.20283	.01650	-.00239	.01266
AC27	.97899	.20283	.01650	-.00239	.01266
AC48	.97899	.20283	.01650	-.00239	.01266
N76	.97899	.20283	.01650	-.00239	.01266
N58	.97899	.20283	.01650	-.00239	.01266
AC65	.97885	.20163	.00646	-.00850	.03303
N62	.97883	.20373	.01494	.00226	.01265
AC30	.97862	.20538	.00671	.00526	.00699
N15	.97788	.20726	.02472	-.00304	.01315
P38AC46	.97600	.13793	-.15222	.05420	-.04788
AC58	.97558	.21297	-.00189	.05225	.01246
N32	.95918	.25620	.11784	-.01040	.01868
ALGAE	.92505	-.34288	-.05751	.14511	.04843
N60	.92125	-.35763	.15292	.00034	.00418
AC10	.90542	.08371	-.12022	-.18834	-.35110
AC36	.89450	-.43181	.10604	-.03377	-.03204
N87	.88996	.26089	-.11593	.35557	-.00672
AC8	.88218	-.18907	-.20057	-.04346	-.37934
AC5	.86480	-.20216	-.09875	.41978	-.15899
N8	.84667	.31648	-.06209	-.19775	.37421
N19	.84262	-.49286	.21695	-.00130	.00316
AN73	.81807	.27468	-.21916	-.26800	-.36805
P40AN44	.80444	.13302	-.31989	-.42002	-.23756
N63AN20	.79834	.26797	-.16004	.51493	.00886
N23	.79696	-.55403	.24059	-.00171	.00238
N48	.77810	-.59462	.20244	.00166	-.00060
N39P6	.76547	-.57556	.12293	.26012	-.00191
AN40	.76352	.23980	-.25277	-.26674	.47380
N33	.75518	-.61391	.22983	.00017	.00004
AN89	-.73977	.22468	-.61785	.06268	.12878
N78	.72571	-.65396	.21370	.00202	-.00196
AC12	-.69788	.12489	-.57323	.39888	.09836
AN62	.63754	.32760	-.35697	.59334	-.08212

AC1	.62269	-.58050	-.15141	.13469	.48395
N52	.43940	-.86375	.24656	.00343	-.00778
N86	.44430	-.84423	.08341	-.17108	.23164
N54	.49137	-.83626	.24325	.00322	-.00687
AC2	.53113	-.80561	-.01189	.25060	.07709
N53	.55563	-.79668	.23775	.00294	-.00567
AC6	.46230	-.75004	-.01554	.46638	-.07725
N44	.65766	-.71884	.22527	.00243	-.00355
P50AN52	-.40956	.68233	.44887	.04948	.40343
P65	-.34535	.44786	.81738	-.03308	.10462
N7	-.39153	.47236	.74005	.27145	.04707
P5	-.41543	.42954	.72849	.33484	.00999
P4	-.30959	.62627	.70909	.08655	.04056
P12	-.44304	.32034	.65808	.11419	-.50496
AC51	-.26222	.18334	-.22128	.92123	-.00018
SUO	-.62550		.85726		
KUNTA	-.46042		.17578		
TCFO	1.99835		.41403		
TCFB	-.01473	-1.98005			
ECFO	-.45858		.27490		
ECFB	-.43912		.25808		
Sample	PC1sco		PC2sco		

PC regression with 24 selected compounds

Dependent Variable.. **ALGAE**

Method: Stepwise Criteria PIN .1500 POUT .3000
AC1 AC10 AC12 AC36 AC5 AC58 AC6 AC8 AN40 AN73
N19 N33 N44 N52 N54 N60 N63AN20 N78 N8
N86 N87 P38AC46 P40AN44 P50AN52

Variable(s) Entered on Step Number

3.. N86
Multiple R 1.00000
R Square 1.00000
Adjusted R Square .99999
Standard Error 1.04330E-03

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	3	.68646	.22882
Residual	1	.00000	.00000
F = 210221.99611		Signif F = .0016	

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl B	Beta
AC36	.610226	.003519	.565517 .654936	.692252
AC5	.281043	.002777	.245752 .316334	.282521
N86	.067666	.002063	.041450 .093882	.081114
Constant	.084143	5.8626E-04	.076694 .091592	

----- in -----

Variable	T	Sig T	
AC36	173.421	.0037	dodecanoic acid (+) **
AC5	101.187	.0063	butanoic acid (+) **
N86	32.796	.0194	phtalate (+) *
(Constant)	143.524	.0044	

S C A T T E R P L O T

Sample	ALGAE	ADJPRED
PC1	.98581	.96175
PC2	.00475	-.00251
PC3	.14263	.16209
PC4	.07872	.08009
PC5	.04015	.03849

LBACT and 67 strongly correlating
($|R| > 0.6$) compounds

SUO	1.00
KUNTA	1.00
TCFO	40.00
TCFB	1.00
ECFO	3.33
ECFB	1.43

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

Variable	Communality		PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
LLBACT	1.00000	*	1	57.11367	84.0	84.0
N19	1.00000	*	2	5.29200	7.8	91.8
N39P6	1.00000	*	3	2.60217	3.8	95.6
N33	1.00000	*	4	1.96408	2.9	98.5
N49	1.00000	*	5	1.02808	1.5	100.0
N60	1.00000	*	6	.00000	.0	100.0
P58	1.00000	*	7	.00000	.0	100.0
AN40	1.00000	*	8	.00000	.0	100.0

PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa	PC3loa	PC4loa	PC5loa
AC14	.99716	.06680	.02048	-.00054	-.02823
AC24	.99710	.06591	.00891	.01275	-.03464
AC67	.99649	.05773	-.01839	.02633	-.05151
AN21	.99649	.05773	-.01839	.02633	-.05151
AC42	.99649	.05773	-.01839	.02633	-.05151
AN34	.99649	.05773	-.01839	.02633	-.05151
AC32	.99649	.05773	-.01839	.02633	-.05151
AC45	.99649	.05773	-.01839	.02633	-.05151
AC54	.99649	.05773	-.01839	.02633	-.05151
AN37	.99649	.05773	-.01839	.02633	-.05151
N81	.99649	.05773	-.01839	.02633	-.05151
AN39	.99649	.05773	-.01839	.02633	-.05151
AC37	.99649	.05773	-.01839	.02633	-.05151
AC48	.99649	.05773	-.01839	.02633	-.05151
P34	.99649	.05773	-.01839	.02633	-.05151
N58	.99649	.05773	-.01839	.02633	-.05151
AN13	.99649	.05773	-.01839	.02633	-.05151
AC26	.99649	.05773	-.01839	.02633	-.05151
AC50	.99649	.05773	-.01839	.02633	-.05151
AC52	.99649	.05773	-.01839	.02633	-.05151
N80	.99649	.05773	-.01839	.02633	-.05151
N83	.99649	.05773	-.01839	.02633	-.05151
N76	.99649	.05773	-.01839	.02633	-.05151
AN30	.99649	.05773	-.01839	.02633	-.05151
N65	.99649	.05773	-.01839	.02633	-.05151
P30	.99649	.05773	-.01839	.02633	-.05151
AC22	.99649	.05773	-.01839	.02633	-.05151
AC27	.99649	.05773	-.01839	.02633	-.05151
P27	.99649	.05773	-.01839	.02633	-.05151
AC30	.99641	.06373	-.00784	.03035	-.04606
AC18	.99641	.05687	.02966	-.04973	-.02428
N62	.99637	.05880	-.01562	.03033	-.05122
AC65	.99606	.06249	-.03653	.03317	-.03903
N15	.99594	.05789	-.02078	.02564	-.06060
N21	.99402	-.02939	-.03766	.01573	-.09693
LBACT	.99384	.07420	.02004	.06539	-.04592

AC58	.99358	.07025	.01416	.07325	-.04803
P58	.99173	.09854	.04152	-.06491	-.02860
P38AC46	.98545	.07453	.09480	.04923	.10916
N32	.98347	.05936	-.04782	.01767	-.16331
AC56	.98319	-.07931	-.14448	.02905	.07304
AN81	.97328	-.22724	-.02204	.00816	.02297
AN63	.95368	.23088	-.04187	-.18822	.00379
AC10	.91596	.03738	.21054	-.32493	.09853
N87	.91046	.14537	.21209	.32329	-.02064
N8	.87857	.23562	-.40840	.07237	.02401
N60	.86779	-.48727	-.02375	-.01034	.09404
P8	.85736	.23198	.24961	-.38164	.05628
AC8	.85648	-.17367	.33195	-.22635	.27360
AN73	.85525	.26727	.19652	-.38645	.09567
AC36	.83290	-.52397	-.00171	-.05875	.16818
AC5	.82747	-.27160	.37845	.27143	.15696
N63AN20	.81791	.16751	.29231	.46626	-.01077
AN40	.78663	.27747	-.48990	.07942	.24065
N19	.77253	-.62588	-.03301	-.02368	.09908
AC25	.75577	.29045	-.51961	.08234	.26017
N23	.71945	-.68496	-.03577	-.02939	.10525
N49	.71455	-.68239	-.02360	-.02591	.15009
AN89	-.70637	.56759	.03808	.16647	.38693
AC12	-.68249	.42157	.23622	.42177	.35042
N39P6	.68167	-.67020	.12995	.19257	.17941
AN41	.67479	.50872	-.23514	-.42097	.23098
AN62	.66629	.32088	.44478	.49549	.09881
P26	.64516	.30562	.37863	-.57780	.11466
N33	.67043	-.72736	-.02958	-.03146	.14006
N48	.69565	-.70043	-.02350	-.02746	.15545
AN82	.57248	.40390	.69401	-.07177	.14943
AN31	.61846	.33427	-.62321	.09180	.33007
SUO	-.51390		.01126		
KUNTA	-.43721		.74525		
TCFO	2.03407		.11783		
TCFB	-.26703	-1.95296			
ECFO	-.44766		.40734		
ECFB	-.36827		.67128		
Sample	PC1sco		PC2sco		

* * * M U L T I P L E R E G R E S S I O N * * * *

Dependent Variable.. LBACT

Method:	Stepwise	Criteria	PIN	.1500	POUT	.3000
AC10	AC12	AC14	AC18	AC22	AC24	AC25
AC27	AC30	AC32	AC36	AC37	AC42	AC45
AC5	AC50	AC52	AC54	AC56	AC58	AC65
AC8	AN13	AN21	AN30	AN31	AN37	AN39
AN41	AN62	AN63	AN73	AN81	AN82	AN89
N19	N21	N23	N32	N33	N34	N39P6
N49	N58	N60	N62	N63AN20	N65	N76
N80	N81	N83	N87	P26	P27	P30
P38AC46	P58	P8				P34

Variable(s) Entered on Step Number

3..	P8
Multiple R	1.00000
R Square	1.00000
Adjusted R Square	1.00000
Standard Error	3.85055E-06

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	3	.75468	.25156
Residual	1	.00000	.00000
F = 16966586041.1		Signif F = .0000 ***	

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce	Intrvl B	Beta
AC58	1.011476	1.4315E-04	1.009657	1.013295	1.012761
P26	.046987	2.3370E-04	.044018	.049956	.049864
P8	-.048349	3.3762E-04	-.052639	-.044059	-.049609
Constant	-3.53348E-06	4.1177E-06	-5.58541E-05	4.87872E-05	

----- in -----

Variable	T	Sig T	
AC58	7065.803	.0001	heptadecanoic acid (+) ***
P26	201.059	.0032	phenol derivative (+) **
P8	-143.206	.0044	heptenyl cyclohexane (-) **
(Constant)	-.858	.5485	

S C A T T E R P L O T

Sample LBACT ADJPRED

PC1	.99384	.99389
PC2	.07420	.07420
PC3	.02004	.02005
PC4	.06539	.06529
PC5	-.04592	-.04591

PCA AND PC REGRESSION WITH LBACT
and 11 strongly correlating compounds

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

Variable	Communality *	PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
LLBACT	1.00000 *	1	9.87233	82.3	82.3
AC18	1.00000 *	2	1.28873	10.7	93.0
AC58	1.00000 *	3	.71333	5.9	99.0
P58	1.00000 *	4	.09530	.8	99.7
P38AC46	1.00000 *	5	.03032	.3	100.0
AC10	1.00000 *	6	.00000	.0	100.0

PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa	PC3loa	PC4loa	PC5loa
AC18	.99679	-.00385	-.01803	.07739	.00871
P58	.99649	.01607	.01341	.07888	-.01886
LBACT	.98710	.06318	-.11198	.09474	-.01144
AC58	.98559	.06256	-.12173	.09891	-.01032
P38AC46	.98252	.13755	-.03140	.04497	.11285
AC10	.94955	-.07113	.27398	-.10095	.08967
N87	.91016	.33179	-.24110	-.05007	-.02991
P8	.90976	.01691	.40189	-.08452	-.05820
AN73	.90261	.03470	.42672	-.01855	-.04071
N63AN20	.81818	.46014	-.32239	-.11678	-.03584
AN89	-.69402	.62832	.31580	.15391	-.01148
AC12	-.67171	.73381	.06340	-.06922	.03896
SUO	-.48592		-.96988	.15591	-1.62152
KUNTA	-.61108		.45035	.29700	.49499
TCFO	2.01609		.03122	-.19655	-.01464
TCFB	-.36527	-1.12770	-.56321	-.60655	1.44098
ECFO	-.41667	1.60741	-.83444	-.83786	-.10481
ECFB	-.13714		.00859	1.87708	-.19501
Sample	PC1sco	PC2sco	PC3sco	PC4sco	PC5sco

* * * M U L T I P L E R E G R E S S I O N * * * *

Dependent Variable.. LBACT
 Method: Stepwise Criteria PIN .1500 POUT .3000
 AC10 AC12 AC18 AC58 AN73 AN89
 N63AN20 N87 P38AC46 P58 P8

Variable(s) Entered on Step Number

3.. P58
 Multiple R 1.00000
 R Square 1.00000
 Adjusted R Square 1.00000
 Standard Error 3.69601E-07

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	3	.79127	.26376
Residual	1	.00000	.00000

F = 1930814261569 Signif F = .0000 ***

Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl B	Beta
AC58	1.011393	6.5174E-06	1.011310 1.011476	1.013111
P58	-.036155	8.3574E-06	-.036261 -.036049	-.035530
P8	.028920	2.2517E-06	.028891 .028948	.027563
Const.	-8.75294E-07	1.9511E-07	-3.35438E-06 1.60380E-06	

----- in -----

Variable	T	Sig T		
AC58	155182.85	.0000	heptadecanoic acid	(+) ***
P58	-4326.145	.0001	branched eicosane	(-) ***
P8	12843.641	.0000	heptenyl cyclohexane	(+) ***
Const.	-4.486	.1396		

S C A T T E R P L O T

PCNro LBACT ADJPRED
 PC1 .98710 .98711
 PC2 .06318 .06318
 PC3 -.11198 -.11198
 PC4 .09474 .09474
 PC5 -.01144 -.01144

MITOK and 33 compounds
 correlating with $|R| > 0.5$

Sample	MITOK
SUO	1.00
KUNTA	1.00
TCFO	1.21
TCFB	2.26
ECFO	7.35
ECFB	12.35

Principal Components Analysis (PC)

PC extracted 2 factors.

PC Matrix:

	PC1nonsc	PC2nscloa	PC2nscsco	PC1scloa	PC2scsco
MITOK	.96710	.16130		.96710	
P74AN8	.90384	-.12232		.90384	
AN86	.85184	.04851		.85184	
AN49	.83640	-.50782		.83640	
N70	-.83431	.20808		-.83431	
AN87	.83189	.21214		.83189	
AN84	.78608	-.02846		.78608	
N114	.76917	-.60868		.76917	
N115	.76174	-.61836		.76174	
N109AN9	.74828	-.55410		.74828	
N57	.74285	.64887		.74285	
N84	.74285	.64887		.74285	
P45	.74285	.64887		.74285	
N92	.74285	.64887		.74285	
N85	.74285	.64887		.74285	
AN19	-.72835	.16253		-.72835	
AN82	.72731	.00995		.72731	
N111	.70891	.45002		.70891	
N113	.70624	-.68378		.70624	
P53	.69727	.66259		.69727	
AN55	.68978	.68179		.68978	
AN70	.67989	.30764		.67989	
AC63	-.67043	.11791		-.67043	
N9	-.66164	.09915		-.66164	
N2	-.63325	.04131		-.63325	
N13	-.58377	.05883		-.58377	
N1	-.57768	-.17816		-.57768	
AC1	-.40385	-.25435		-.40385	
N8	-.38797	.11005		-.38797	
N69	.62141	-.76521		.62141	
N99	.64819	-.74155		.64819	
N100	.66201	-.73696		.66201	
N66P25	.67339	-.71124		.67339	
AN46	.57160	.69984		.57160	
SUO	-.89896		.07441	-.59285	.04182
KUNTA	-.81595		.23924	-.53811	.13447
TCFO	-.27975		.13144	-.18449	.07388
TCFB	-.47991		.00961	-.31649	.00540
ECFO	.95824		-1.77920	.63194	-1.00000
ECFB	1.51634		1.32450	1.00000	.74444
	PC2nscloa		PC2nscsco	PC1scloa	PC2scsco

MITOK and 24 selected compounds

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

Variable	Communality	*	PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
MITOK	1.00000	*	1	12.93243	51.7	51.7
AC1	1.00000	*	2	5.41830	21.7	73.4
AC13	1.00000	*	3	3.77719	15.1	88.5
AC63	1.00000	*	4	2.21336	8.9	97.4
AN46	1.00000	*	5	.65873	2.6	100.0
AN49	1.00000	*	6	.00000	.0	100.0

PC extracted 5 factors

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa		PC3loa	PC4loa	PC5loa
MITOK	.96833	.02820		-.22650	-.06615	.07658
AC1	-.47986	-.17558		.59984	-.15321	.59635
AC13	.77794	.42695		-.43757	-.06071	.13177
AC63	-.62265	.26395		-.09522	.70428	.19377
AN46	.67543	.65121		.34161	.04914	-.02471

AN49	.77274	-.60333	-.14856	.12582	.03114
AN55	.76588	.59191	-.23413	.05008	.07588
AN70	.74814	.26103	.59946	.07795	-.08200
AN82	.75719	-.04851	.63802	-.00134	-.13132
AN84	.80793	-.08927	.57567	.06589	-.05946
AN86	.88513	-.01932	.43601	.15198	-.05445
AN87	.87964	.14701	.42798	.14592	.01290
N100	.57702	-.80154	-.00936	.15573	.01534
N111	.74929	.38115	-.32707	.28871	.32089
N23	-.35155	.07927	.66878	-.61093	.22275
N66P25	.58800	-.77899	-.10803	.18296	.04772
N69	.52966	-.82783	-.08491	.16105	.03193
N70	-.77455	.35752	-.01487	.51818	.05928
N8	-.31559	.22699	.85853	.31221	-.11968
N84	.81236	.54039	-.20413	-.07982	.00271
N85	.81236	.54039	-.20413	-.07982	.00271
N9	-.58469	.25526	.13731	.75577	-.05425
N92	.81236	.54039	-.20413	-.07982	.00271
N99	.55897	-.80809	-.09229	.15812	.03202
P74AN85	.90045	-.19004	.19485	.29784	.16248
SUO	-.78164	.08785	-.83809	-.15939	-1.67934
KUNTA	-.75351	.48859	-.31101	1.57886	.87786
TCFO	-.17821	.24933	1.97878	-.08490	-.38725
TCFB	-.69295	-.06596	-.32138	-1.52434	1.12037
ECFO	.74808	-1.86287	-.09161	.35271	.06283
ECFB	1.65822	1.10307	-.41669	-.16293	.00553
Sample	PC1sco	PC2sco	PC3sco	PC4sco	PC5sco

*** MULTIPLE REGRESSION ***

Dependent Variable.. MITOK

Method: Stepwise Criteria PIN .1000 POUT .2000

Variable(s) Entered on Step Number

3.. N70

Multiple R 1.00000

R Square 1.00000

Adjusted R Square .99999

Standard Error 1.33040E-03

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	3	.87818	.29273
Residual	1	.00000	.00000

F = 165384.43824 Signif F = .0018 **

Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl B	Beta
AC13	.587859	.001694	.566329 .609390	.581546
N70	-.203459	.002466	-.234790 -.172127	-.216651
P74AN85	.461944	.002901	.425082 .498806	.390342
Const	-.062719	.001087	-.076531 -.048907	

----- in -----

Variable	T	Sig T	
AC13	346.924	.0018	dimethyl hexanoic acid (+) **
N70	-82.511	.0077	1-methyl-4-(1-methylethyl)-1,2-cyclohexanediol (-) **
P74AN85	159.230	.0040	hexacosane (+) **
Const	-57.696	.0110	

SCATTER PLOT

PC Nr	MITOK	ADJPRED
PC1	.96833	.95869
PC2	.02820	.02436
PC3	-.22650	-.23078
PC4	-.06615	-.08371
PC5	.07658	.07811

LIITE 2.

Kroonisten kalavaikutusten ja aineiden monimuuttuja-analyysi

Chronic fish effects and 7 strongly correlating ($R > 0.5$) substance groups

Sample	LSI	CF	GROWTH	HB	HCT	MCHC
SUO	1.19	1.26	69.30	1.28	36.10	3.55
KUNTA	1.16	1.30	72.80	1.44	37.40	3.85
TCFOLD	1.25	1.34	76.90	1.16	33.80	3.43
TCFOHD	1.22	1.33	93.90	1.21	33.90	3.57
TCFBLD	1.33	1.33	103.30	1.19	33.80	3.52
TCFBHD	1.18	1.34	78.10	1.12	33.30	3.36
ECFOLD	1.29	1.35	72.30	1.22	33.60	3.63
ECFOHD	1.30	1.30	76.60	1.23	35.00	3.51
ECFBLD	1.27	1.37	80.00	1.13	33.70	3.35
ECFBHD	1.20	1.26	74.30	1.31	35.40	3.70

Sample	LCT	EROD	UDP	GLYC	LIPID
SUO	.86	12.50	564.30	5.77	1.79
KUNTA	.89	12.70	732.20	6.79	1.67
TCFOLD	1.06	10.70	732.10	7.58	1.48
TCFOHD	.91	11.17	677.60	6.47	1.74
TCFBLD	.77	12.18	727.10	8.31	1.45
TCFBHD	.81	10.79	716.20	5.88	1.97
ECFOLD	1.03	12.19	768.90	6.69	1.66
ECFOHD	.84	11.36	677.70	7.39	1.73
ECFBLD	.92	14.50	788.30	6.34	1.07
ECFBHD	1.03	11.34	709.90	7.16	1.73

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

Variable	Communality	*	PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
LSI	1.00000	*	1	7.89648	43.9	43.9
CF	1.00000	*	2	3.27838	18.2	62.1
HB	1.00000	*	3	1.90507	10.6	72.7
GROWTH	1.00000	*	4	1.76628	9.8	82.5
HCT	1.00000	*	5	1.34389	7.5	89.9
LCT	1.00000	*	6	.65630	3.6	93.6
MCHC	1.00000	*	7	.51371	2.9	96.4
EROD	1.00000	*	8	.37700	2.1	98.5
UDP	1.00000	*	9	.26290	1.5	100.0
GLYC	1.00000	*	10	.00000	.0	100.0

PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa	PC3loa	PC4loa	PC5loa
HCT	.87365	.33848	.29434	.06919	-.00987
ETB	.84225	-.09478	.24451	-.03123	.16546
CF	-.84048	.00501	.01475	-.23677	.27079
UHC	.83090	-.09569	-.36607	.06221	.21865
HB	.78763	.55646	.15933	.12259	-.03904
S	.73624	-.39606	.42154	.14287	-.20705
UDP	-.70178	.59646	.01422	-.21517	.06421
EST	.70153	-.43901	.20492	.22497	-.29768

	PC1loa	PC2loa		PC3loa	PC4loa	PC5loa
LSI	-.68666	-.10445		.32942	.51674	-.27353
PHT	.68525	.59584		-.12791	-.02198	.07552
SHC	.66832	-.65122		.08473	-.13386	.13197
ARA	.55045	.67691		-.08190	.04944	.33426
MCHC	.62270	.66527		.02287	.16922	-.08299
EROD	-.09560	.14839		.87621	-.27156	.27795
LIPID	.61169	-.26657		-.66550	.07120	-.04394
GLYC	-.38016	.39445		.01669	.75165	-.27979
GROWTH	-.50426	-.00834		-.09869	.62823	.50076
LCT	-.13941	.43714		-.13861	-.46182	-.65830
SUO	1.56895		-1.71205	1.03163	-.34606	-.30276
KUNTA	1.42140		1.81211	.47709	-.16982	.96007
TCFOLD	-.87803		.15187	-.52639	-.30030	-1.24070
TCFOHD	.05486		-.03721	-.96664	.28596	1.12304
TCFBLD	-1.09451		-.02894	.46055	2.04877	.71173
TCFBHD	-.18653		-1.08516	-1.65777	-.86948	1.04210
ECFOLD	-.67321		.29967	.14308	-.67415	-1.15861
ECFOHD	.46101		-.57484	.23688	1.30638	-.84210
ECFBLD	-1.23655		.10136	1.65348	-1.25057	.71939
ECFBHD	.56261		1.07319	-.85193	-.03074	-1.01216
Sample	PC1sco	PC2sco		PC3sco	PC4sco	PC5sco

P C R E G R E S S I O N

Dependent Variable.. LSI

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	1	.57815	.57815
Residual	3	.34507	.11502
F =	5.02631	Signif F =	.1108

Variables in the Equation					
Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl B	Beta	
UHC	-.849718	.379009	-2.055878	.356442	-.791347
Constant	.066767	.159476	-.440748	.574283	

in			
Variable	T	Sig T	
UHC	-2.242	.1108	-
(Constant)	.419	.7036	

Dependent Variable.. CF

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	2	.69037	.34519
Residual	2	.02189	.01094
F =	31.54236	Signif F =	.0307 *

Variables in the Equation					
Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl B	Beta	
EST	-.744704	.115100	-1.239944	-.249464	-.806287
PHT	-.552274	.141058	-1.159206	.054658	-.487906
Const.	.034739	.058021	-.214908	.284387	

in			
Variable	T	Sig T	
EST	-6.470	.0231	*
PHT	-3.915	.0595	
Constant)	.599	.6101	

Dependent Variable.. HB

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	3	.47869	.15956
Residual	1	.00033	.00033
F =	489.87788	Signif F =	.0332 *

```

----- Variables in the Equation -----
Variable      B      SE B      95% Confdnce Intrvl B      Beta
EST           .260486   .033800   -.168980   .689951   .343902
ETB           1.776540   .061946   .989436   2.563643   1.908530
SHC          -1.083280   .048832   -1.703746   -.462814   -1.494123
Const.       -.085905   .015045   -.277073   .105262

```

```

----- in -----
Variable      T      Sig T
EST           7.707   .0821
ETB          28.679   .0222 *
SHC         -22.184   .0287 *
(Constant)   -5.710   .1104

```

Dependent Variable.. MCHC

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	1	.40248	.40248
Residual	3	.07354	.02451
F =	16.41806	Signif F = .0271 *	

```

----- Variables in the Equation -----
Variable      B      E B      95% Confdnce Intrvl B      Beta
PHT           .850887   .209996   .182596   1.519179   .919513
Const.       .074057   .086438   -.201022   .349137

```

```

----- in -----
Variable      T      Sig T
PHT           4.052   .0271 *
(Constant)    .857   .4546

```

Dependent Variable.. LCT

No variables entered/removed for this block.

Dependent Variable.. EROD

No variables entered/removed for this block.

Dependent Variable.. UDP

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	1	.76590	.76590
Residual	3	.12127	.04042
F =	18.94747	Signif F = .0224 *	

```

----- Variables in the Equation -----
Variable      B      SE B      95% Confdnce Intrvl B      Beta
EST          -.957769   .220032   -1.657997   -.257540   -.929145
Constant     .027200   .091576   -.264232   .318632

```

```

----- in -----
Variable      T      Sig T
EST          -4.353   .0224 *
(Constant)    .297   .7858

```

Dependent Variable.. GLYC

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	3	.89281	.29760
Residual	1	.00028	.00028
F =	1079.21083	Signif F = .0224 *	

```

----- Variables in the Equation -----
Variable      B      SE B      95% Confdnce Intrvl B      Beta
EST           1.189405   .032511   .776308   1.602501   1.150029
ETB          -2.327072   .043709   -2.882444   -1.771700   -1.830891
PHT           .480081   .026812   .139405   .820757   .378765
Constant     .414959   .010107   .286533   .543385

```



```

----- in -----
Variable      T    Sig T
EST           36.584 .0174 *
ETB          -53.240 .0120 *
PHT           17.906 .0355 *
(Constant)    41.055 .0155

```

Dependent Variable.. LIPID
Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	1	.81999	.81999
Residual	3	.05794	.01931

F = 42.46025 Signif F = .0073 **

```

----- Variables in the Equation -----
Variable      B          SE B      95% Confdnce Intrvl B      Beta
UHC           1.011954 .155299 .517729 1.506178 .966441
Constant     -.190178 .065345 -.398133 .017777

```

```

----- in -----
Variable      T    Sig T
UHC           6.516 .0073 **
(Constant)    -2.910 .0620

```

LSI and 17 compounds
correlating with $|R| > 0.5$

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

Variable	Communality	* PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
LSI	1.00000	* 1	9.92236	55.1	55.1
AC19	1.00000	* 2	3.33637	18.5	73.7
AC63	1.00000	* 3	1.49378	8.3	82.0
AN19	1.00000	* 4	1.40810	7.8	89.8
AN22	1.00000	* 5	1.13057	6.3	96.1
AN41	1.00000	* 6	.42640	2.4	98.4
AN42	1.00000	* 7	.25684	1.4	99.9
AN45	1.00000	* 8	.02557	.1	100.0
AN78	1.00000	* 9	.00000	.0	100.0
AN88	1.00000	* 10	.00000	.0	100.0

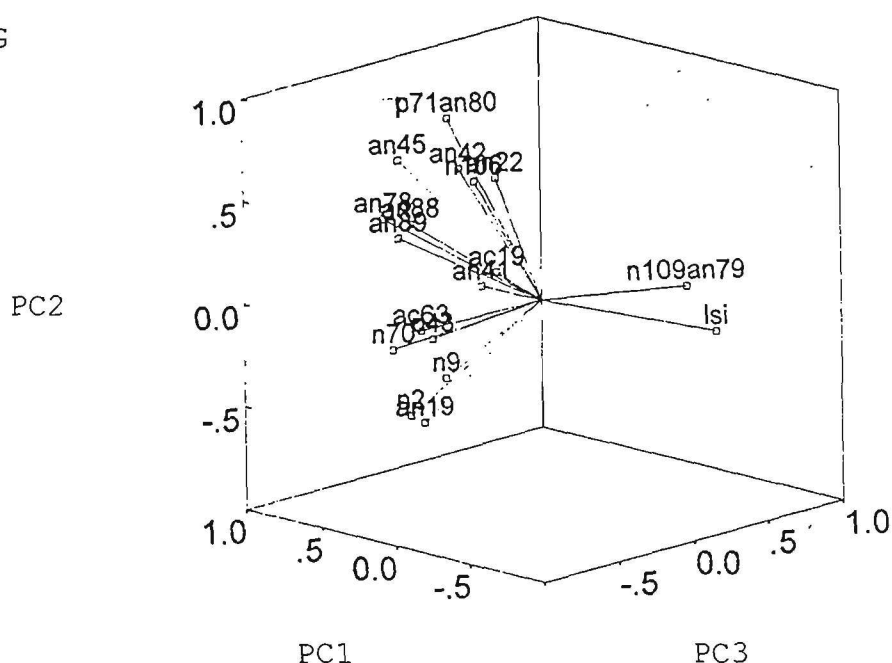
PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa	PC3loa	PC4loa	PC5loa
N70	.86765	-.37026	-.14233	-.22931	.16021
AC63	.86518	-.31539	.04744	-.25669	.28665
LSI	-.85145	-.06309	.30717	.09882	.11699
AN42	.82286	.43819	.26921	.01502	.00266
AC19	.81250	-.11186	.51351	-.08309	.17113
AN88	.80779	.23925	-.07572	.36997	.36866
AN78	.80573	.30324	-.26228	.03187	-.40132
AN89	.80240	.18799	-.16402	.40073	.35352
N106	.80201	.36312	.35484	-.23581	-.05291
N9	.79406	-.55252	.13980	-.16286	.13266
AN41	.73093	-.12770	.32561	.22152	-.51020
AN22	.70928	.38593	.40758	-.15330	-.08757
N2	.67799	-.64453	-.21485	.14418	.07931
P43	.64014	-.28379	-.10310	.53016	-.42428
P71AN80	.49050	.82320	-.13969	-.22413	-.08747
AN19	.69277	-.70198	-.10767	.02034	-.11253

	PC1loa	PC2loa	PC3loa	PC4loa	PC5loa
AN45	.56011	.66040	-.40657	.22450	.18091
N109AN79	-.44544	.04335	.51820	.64549	.17345
SUO	.43114		-1.38989	-1.94106	.37222
KUNTA	1.98758		-.45439	1.11840	-1.32533
TCFOLD	-.79970		-.45721	.33316	-.47070
TCFOHD	.69213		-1.05442	.29741	1.13389
TCFBLD	-.98898		-.00975	-.08227	-1.17548
TCFBHD	.18198		1.39178	-1.64608	-.66937
ECFOLD	-1.10569		-.20383	.80453	.14861
ECFOHD	-.42061		.18317	.38611	1.65428
ECFBLD	-.80568		.11990	.40370	-.52474
ECFBHD	.82784		1.87464	.32609	.85662
Sample	PC1sco	PC2sco	PC3sco	PC4sco	PC5sco

3D LOADING
PLOT:



Further PCA with 13 selected compounds:

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

Variable	Communality	*	PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
LSI	1.00000	*	1	8.07374	57.7	57.7
N70	1.00000	*	2	1.89260	13.5	71.2
AC63	1.00000	*	3	1.40404	10.0	81.2
AN42	1.00000	*	4	1.12614	8.0	89.3
AC19	1.00000	*	5	1.03795	7.4	96.7
AN88	1.00000	*	6	.25644	1.8	98.5
AN78	1.00000	*	7	.18650	1.3	99.8
AN89	1.00000	*	8	.02258	.2	100.0

PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa	PC3loa	PC4loa	PC5loa
AN42	.88920	-.14425	.17727	.24661	.26449
AN78	.86203	-.19329	-.08919	-.37976	.21347
LSI	-.85638	.01282	.24606	.21897	.06652

	PC11loa	PC21loa	PC31loa	PC41loa	PC51loa
AN88	.84843	-.13459	.33051	.10614	-.36292
AN89	.83253	-.12532	.30849	.01463	-.43337
N106	.82611	-.06161	-.02839	.30743	.35881
N70	.79050	.42495	-.33840	.04366	-.26067
AC63	.78750	.43191	-.26362	.25665	-.23102
AC19	.76762	.42704	.12087	.43595	.13609
AN41	.69817	.41285	.26133	-.25623	.44195
AN45	.68340	-.67066	.11861	-.08861	-.24540
P71AN80	.62732	-.70602	-.15008	.08977	.27158
N109AN79	-.43374	.05204	.83071	.19390	.01700
P43	.58375	.35461	.32454	-.62464	-.01759
SUO	.17645	.54576	-.77444	-1.64895	-1.73752
KUNTA	1.79994	1.09417	-.75430	1.69707	.08011
TCFOLD	-.87349	.49098	-.36278	-.10192	.60689
TCFOHD	.59147	1.36242	.87938	-1.21996	.64935
TCFBLD	-.99396	-.16257	-1.05942	.27360	.44595
TCFBHD	.53703	-1.82173	-1.03166	.01626	-.56566
ECFOLD	-1.16384	.20032	.52191	.60420	.19687
ECFOHD	-.35395	-.25073	1.80095	.99184	-1.62148
ECFBLD	-.81397	-.06006	-.28782	.07535	.74325
ECFBHD	1.09432	-1.39855	1.06818	-.68748	1.20224
Sample	PC1sco	PC2sco	PC3sco	PC4sco	PC5sco

* * * * M U L T I P L E R E G R E S S I O N * * * *

LSI AND 13 SELECTED COMPOUNDS

Dependent Variable.. **LSI**

Method: Stepwise Criteria PIN .1500 POUT .3000
AC19 AC63 AN41 AN42 AN45 AN78 AN88 AN89
N106 N109AN79 N70 P43 P71AN80

Variable(s) Entered on Step Number

1.. AN78

Multiple R .91199

R Square .83172

Adjusted R Square .77563

Standard Error .21538

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	1	.68783	.68783
Residual	3	.13917	.04639

F = 14.82730 Signif F = .0309 *

Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl B	Beta
AN78	-.853582	.221674	-1.559036 -.148128	-.911986
Const.	.008148	.098049	-.303883 .320179	

----- in -----

Variable	T	Sig T
AN78	-3.851	.0309
(Constant)	.083	.9390

Variable(s) Entered on Step Number

2.. AC63

Multiple R .99959

R Square .99918

Adjusted R Square .99837

Standard Error .01836

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	2	.82633	.41316
Residual	2	.00067	.00034
F =	1225.53825	Signif F =	.0008 ***

---- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce	Intrvl B	Beta
AC63	-.464868	.022936	-.563553	-.366182	-.458016
AN78	-.661055	.021150	-.752059	-.570051	-.706286
Const.	.083482	.009148	.044122	.122841	

----- in -----

Variable	T	Sig T
AC63	-20.268	.0024
AN78	-31.255	.0010
(Constant)	9.126	.0118

----- Variables not in the Equation -----

Variable	Beta In	Partial	Min Toler	T	Sig T
AC19	-.030435	-.172594	.026219	-.175	.8896
AN41	-.001316	-.026362	.285533	-.026	.9832
AN42	-.010250	-.183584	.261540	-.187	.8825
AN45	-.025910	-.619981	.417051	-.790	.5743
AN88	-.035371	-.893948	.520777	-1.995	.2958
AN89	-.037718	-.938494	.504748	-2.718	.2244
N106	.022555	.427261	.292576	.473	.7190
N109AN79	-.052472	-.999979	.296099	-155.029	.0041
N70	.005333	.026222	.019711	.026	.9833
P43	-.020420	-.547642	.512964	-.655	.6311
P71AN80	.008933	.208923	.368269	.214	.8660

Variable(s) Entered on Step Number

3..	N109AN79
Multiple R	1.00000
R Square	1.00000
Adjusted R Square	1.00000
Standard Error	1.67491E-04

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	3	.82700	.27567
Residual	1	.00000	.00000
F =	9826597.73114	Signif F =	.0002 ***

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce	Intrvl B	Beta
AC63	-.495933	2.8970E-04	-.499614	-.492252	-.488623
AN78	-.680480	2.3005E-04	-.683403	-.677556	-.727040
N109AN79	-.052324	3.3751E-04	-.056612	-.048035	-.052472
Const.	.098090	1.2587E-04	.096491	.099690	

----- in -----

Variable	T	Sig T		
AC63	-1711.881	.0004	phtalate	(-) ***
AN78	-2957.947	.0002	tetracosane	(-) ***
N109AN79	-155.029	.0041	branched pentacosane	(+) **
Constant	779.304	.0008		

S C A T T E R P L O T

Sample	LSI	ADJPRED
PC1	-.85638	-.85524
PC2	.01282	.01259
PC3	.24606	.24112
PC4	.21897	.21922
PC5	.06652	.06389

CF and 21 compounds
correlating with $|R| > 0.5$

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

Variable	Communality	* PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
CF	1.00000	* 1	14.37863	65.4	65.4
AC12	1.00000	* 2	4.37941	19.9	85.3
AN45	1.00000	* 3	1.13093	5.1	90.4
AN88	1.00000	* 4	1.05046	4.8	95.2
AN89	1.00000	* 5	.56375	2.6	97.7
N107P68A	1.00000	* 6	.40600	1.8	99.6
N111	1.00000	* 7	.09081	.4	100.0
N2	1.00000	* 8	.00000	.0	100.0
N4	1.00000	* 9	.00000	.0	100.0
N47AN3	1.00000	* 10	.00000	.0	100.0

PC extracted 2 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa
P4	.98784	-.12693
N107P68A	.95690	-.17527
N47AN3	.94329	-.05635
P5	.93939	.23054
N7	.93722	-.24740
P55	.92417	-.35142
P2	.92393	-.35152
P50AN52	.92260	.10222
P70	.92162	-.05245
P36	.91635	-.36330
P41AN48	.91258	-.37949
N4	.90684	-.03421
P11AN15	.90365	-.33588
P12	.88216	.11731
N2	.79891	.02893
CF	-.75990	-.49013
P43	.63352	.23252
N111	.01564	.84960
AN88	.43872	.84727
AN89	.56225	.78974
AC12	.32422	.78068
AN45	.32793	.76358
SUO	2.59597	-1.04465
KUNTA	.02324	1.14434
TCFOLD	-.69296	-.93602
TCFOHD	-.07965	-.11546
TCFBLD	-.73415	-.77546
TCFBHD	-.38636	.47402
ECFOLD	-.60587	-.74431
ECFOHD	.44753	1.03741
ECFBLD	-.70642	-.70158
ECFBHD	.13869	1.66171
Sample	PC1sco	PC2sco

CF and 10 compounds selected from 2D PCA

Principal Components Analysis (PC)

PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC1	PC2	PC3	PC4	PC5
AN89	.93354	.23508	.17506	.00842	.20428
CF	-.89828	.01750	.19459	-.09061	.29340
P5	.88421	-.32635	-.07502	-.30548	.08114
AN88	.87246	.32834	.24601	.03995	.25687
P50AN52	.80402	-.50043	.21703	-.11711	-.18018
P12	.75235	-.25251	-.52721	-.26562	-.09457
AN45	.71282	.52779	-.27713	-.14722	.29696
AC12	.70480	.47160	.36050	-.23394	-.26781
N2	.68845	-.61562	.29320	.17945	.03043
P43	.67909	-.36964	-.16810	.56904	.13059
N111	.51405	.69438	-.11480	.38877	-.27145

* * * * MULTIPLE REGRESSION * * * *

Dependent Variable.. CF

Method: Stepwise Criteria PIN .1500 POUT .3000
 AC12 AN45 AN88 AN89 N111 N2 P12 P43 P5 P50AN52

Variable(s) Entered on Step Number

1.. P12

Multiple R .89141

R Square .79461

Adjusted R Square .72615

Standard Error .24721

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	1	.70930	.70930
Residual	3	.18334	.06111
F =	11.60635	Signif F = .0422 *	

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confidence Interval B	Beta
P12	-.860822	.252677	-1.664941 -.056703	-.891409
Const.	-.163404	.112277	-.520715 .193907	

----- in -----

Variable	T	Sig T	
P12	-3.407	.0422	4-tridecanone (-) *
(Constant)	-1.455	.2416	

----- Variables not in the Equation -----

Variable	Beta In	Partial	Min Toler	T	Sig T
AC12	-.271394	-.533112	.792529	-.891	.4669
AN45	.248234	.345659	.398249	.521	.6543
AN88	-.177448	-.177369	.205207	-.255	.8226
AN89	-.323894	-.270340	.143085	-.397	.7297
N111	-.322717	-.665885	.874448	-1.262	.3341
N2	-.131341	-.241869	.696531	-.353	.7581
P43	-.146135	-.239701	.552602	-.349	.7603
P5	.123320	.113365	.173570	.161	.8866
P50AN52	-.259050	-.405722	.503812	-.628	.5943

S C A T T E R P L O T

Sample	CF	ADJPRED
PC1	-.89828	.18493
PC2	.01750	.06498
PC3	.19459	.35738
PC4	-.09061	.11365
PC5	.29340	-.17602

GROWTH and 50 compounds
correlating with $|R| > 0.4$

Correlations

Comp.	GROWTH	Comp.	GROWTH	Comp.	GROWTH	Comp.	GROWTH
AC12	-.4673	AC48	.4496	N19	.4412	N76	.4496
AC14	.4371	AC50	.4496	N32	.4128	N78	.4103
AC18	.4433	AC52	.4496	N33	.4150	N80	.4496
AC22	.4496	AC54	.4496	N34	.4496	N81	.4496
AC24	.4398	AC56	.4458	N39P6	.4040	N83	.4496
AC26	.4496	AC58	.4439	N4	-.4877	P12	-.4139
AC27	.4496	AC65	.4450	N47AN3	-.4246	P27	.4496
AC30	.4439	AC67	.4496	N48	.4286	P30	.4496
AC32	.4496	AN13	.4496	N49	.4341	P34	.4496
AC36	.4146	AN21	.4496	N58	.4496	P4	-.4011
AC37	.4496	AN30	.4496	N60	.4725	P5	-.4151
AC42	.4496	AN37	.4496	N62	.4491	P50AN52	-.4633
AC45	.4496	AN39	.4496	N65	.4496	P58	.4335

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

Variable	Communality	*	PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
GROWTH	1.00000	*	1	39.90985	78.3	78.3
AC12	1.00000	*	2	5.74099	11.3	89.5
AC14	1.00000	*	3	3.39219	6.7	96.2
AC18	1.00000	*	4	.87992	1.7	97.9
AC22	1.00000	*	5	.55144	1.1	99.0
AC24	1.00000	*	6	.42718	.8	99.8
AC26	1.00000	*	7	.09843	.2	100.0
AC27	1.00000	*	8	.00000	.0	100.0

PC extracted 2 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa
AC45	.99222	.07940
AC22	.99222	.07940
N76	.99222	.07940
AN13	.99222	.07940
AN37	.99222	.07940
AC27	.99222	.07940
N34	.99222	.07940
AN39	.99222	.07940
AC52	.99222	.07940
N58	.99222	.07940
AC26	.99222	.07940
AC42	.99222	.07940
AC48	.99222	.07940
N83	.99222	.07940
AC67	.99222	.07940
AC54	.99222	.07940
AN21	.99222	.07940
N80	.99222	.07940
AC32	.99222	.07940
P30	.99222	.07940
N81	.99222	.07940
AC37	.99222	.07940
AC50	.99222	.07940
AN30	.99222	.07940
N65	.99222	.07940
N62	.99206	.08075

	PC1loa	PC2loa	
AC65	.99193	.08148	
AC30	.99169	.08719	
AC24	.99150	.08641	
AC14	.99088	.08576	
AC18	.99033	.06509	
AC58	.98875	.09513	
AC56	.98598	-.00114	
P58	.98323	.08117	
N32	.98044	.17374	
N60	.89655	-.17880	
AC36	.85167	-.16091	
N19	.81323	-.21707	
N49	.76191	-.27527	
N48	.74506	-.28447	
N39P6	.72782	-.21970	
N33	.72274	-.27785	
N78	.69173	-.31086	
GROWTH	.48435	-.43053	
AC12	-.43736	.38436	
P4	-.10731	.95101	
P50AN52	-.14189	.93275	
N4	-.31151	.87863	
N47AN3	-.24389	.87858	
P5	-.06532	.87721	
P12	-.21746	.77010	
SUO	-.49668		2.25475
KUNTA	-.43497		.17392
TCFOLD	.22137		-.53711
TCFOHD	2.77336		.33289
TCFBLD	-.30988		-1.02922
TCFBHD	-.05154		-1.08566
ECFOLD	-.42485		-.43451
ECFOHD	-.45122		.80574
ECFBLD	-.40867		-.62445
ECFBHD	-.41690		.14365
Sample	PC1sco	PC2sco	

Compounds having negative PC1loa or PC2loa were selected to further PCA.

GROWTH and 18 selected compounds

Principal Components Analysis (PC)

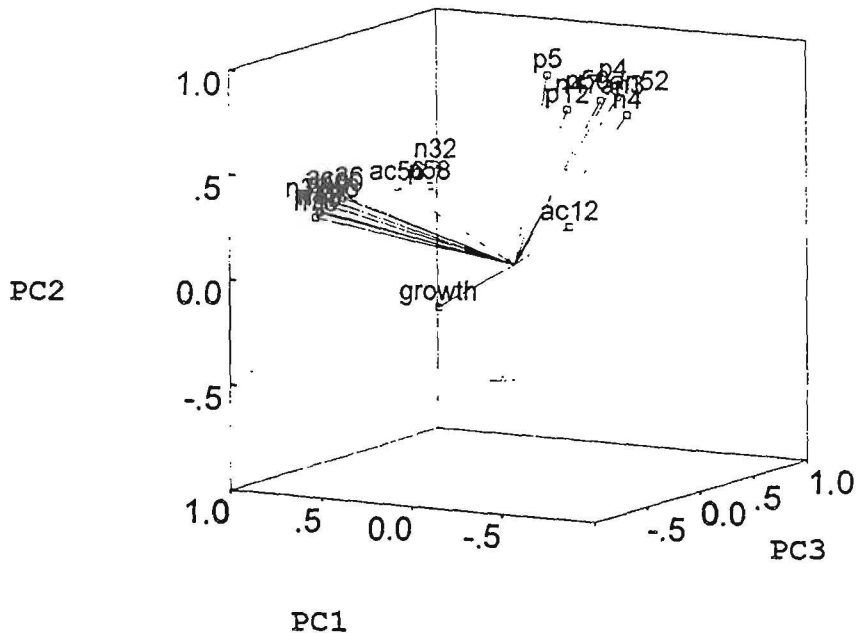
Initial Statistics:

Variable	Communality	* PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
GROWTH	1.00000	* 1	10.75408	56.6	56.6
AC56	1.00000	* 2	4.99415	26.3	82.9
P58	1.00000	* 3	1.39939	7.4	90.3
N32	1.00000	* 4	.82910	4.4	94.6
N60	1.00000	* 5	.54766	2.9	97.5
AC36	1.00000	* 6	.39342	2.1	99.6
N19	1.00000	* 7	.08219	.4	100.0
N49	1.00000	* 8	.00000	.0	100.0

PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa	PC3loa	PC4loa	PC5loa
N60	.97031	.23862	.01796	.02105	-.02631
N19	.95783	.24967	-.12725	-.03942	-.02585
N49	.95222	.21023	-.20942	-.04607	-.01843
AC36	.94885	.28004	-.08337	.08314	-.01229
N48	.94698	.20650	-.23265	-.05298	-.01753
N33	.93477	.22075	-.25873	-.07279	-.01948
N78	.92758	.19454	-.30118	-.07344	-.01479
N39P6	.90333	.25795	-.27874	.06464	.08335
AC56	.86398	.24873	.37384	.22316	-.03290
P58	.77102	.23679	.52675	.17356	-.05062
N32	.74846	.33819	.54759	.11457	-.05294
P5	-.26284	.94862	-.13995	.04785	.08693
P4	-.41990	.86405	.20118	-.17998	-.02763
N47AN3	-.47500	.82317	-.01542	-.24114	.04269
P50AN52	-.46217	.81257	.17094	.16838	.04061
P12	-.37180	.79107	-.14687	-.28850	-.01419
N4	-.57166	.74765	.07197	.03314	.05916
C12	-.50841	.27185	-.36940	.65306	.28010
GROWTH	.57608	-.28490	.26982	-.27449	.66149
SUO	-1.09487		2.13431	.42988	-1.30092
KUNTA	-.57575		-.15566	.11226	1.82772
TCFOLD	.16624		-.75414	.52725	-.20600
TCFOHD	2.20136		.85325	1.38556	.51572
TCFBLD	.11755		-1.03221	.29483	-1.31346
TCFBHD	1.21362		.25553	-2.45557	-.42154
ECFOLD	-.42479		-.79740	.11532	-.03062
ECFOHD	-.72506		.60639	-.57077	1.21522
ECFBLD	-.34529		-.98704	.34136	-.48738
ECFBHD	-.53301		-.12302	-.18012	.20125
Sample	PC1sco	PC2sco	PC3sco	PC4sco	PC5sco

3D LOADING
PLOT

* * * MULTIPLE REGRESSION * * * *

Dependent Variable.. GROWTH
 Method: Stepwise Criteria PIN .2000 POUT .4000
 AC12 AC36 AC56 N19 N32 N33 N39P6 N4 N47AN3 N48
 N49 N60 N78 P12 P4 P5 P50AN52 P58

Variable(s) Entered on Step Number

3.. AC12
 Multiple R .99587
 R Square .99176
 Adjusted R Square .96706
 Standard Error .08213
 Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	3	.81227	.27076
Residual	1	.00675	.00675

F = 40.13965 Signif F = .1154 -

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce	Intrvl B	Beta
AC12	-.319783	.099256	-1.580955	.941388	-.344837
N4	4.774870	.699085	-4.107844	13.657584	4.928035
P50AN52	-5.423722	.715862	-14.519612	3.672168	-5.448183
Constant	.677809	.068578	-.193555	1.549172	

----- in -----

Variable	T	Sig T		
AC12	3.222	.1916	heptanoic acid	(-) -
N4	6.830	.0925	2-methyl-2-pentanethiol	(+) O
P50AN52	-7.576	.0835	eicosane	(-) O
Constant	9.884	.0642		

S C A T T E R P L O T
 PCNro GROWTH ADJPRED
 PC1 .57608 .73905
 PC2 -.28490 -.10994
 PC3 .26982 .15224
 PC4 -.27449 -.85869
 PC5 .66149 .04988

HB and 21 compounds
 correlating with $|R| > 0.5$

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

Variable	Communality	*	PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
HB	1.00000	*	1	12.74391	57.9	57.9
AC12	1.00000	*	2	3.60368	16.4	74.3
AC19	1.00000	*	3	2.40627	10.9	85.2
AC3	1.00000	*	4	1.83572	8.3	93.6
AC63	1.00000	*	5	.87451	4.0	97.6
AC66	1.00000	*	6	.47054	2.1	99.7
AN19	1.00000	*	7	.06537	.3	100.0
AN22	1.00000	*	8	.00000	.0	100.0

PC extracted 2 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	Pc2loa
AC63	.92744	.22926
AC19	.89850	-.18473
HB	.89299	-.01698
N3	.86635	-.07147
N9	.85754	.38213
P47	.85705	-.08551
P35AN43	.85126	.00975
N70	.84000	.35573
AC3	.83683	-.08665
AC66	.82244	-.10181
AN88	.79029	-.16288
AN89	.77741	-.07006

N106	.75656	-.52419	
AN42	.71246	-.55760	
AN22	.68971	-.55647	
N2	.68782	.65845	
AC12	.65644	-.26854	
AN19	.63616	.62041	
P50AN52	.63398	.62182	
AN41	.53381	-.12560	
N111	.47810	-.72805	
N4	.49276	.68109	
SUO	.28106		2.22385
KUNTA	2.46280		-.19090
TCFOLD	-.79359		.15591
TCFOHD	.12463		.57857
TCFBLD	-.85564		-.05079
TCFBHD	-.36167		-.44310
ECFOLD	-.70389		.01055
ECFOHD	.36772		-.13441
ECFBLD	-.79957		-.32273
ECFBHD	.27815		-1.82695
Sample	PC1sco		PC2sco

HB and 15 selected compounds

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

Variable	Communality	*	PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
HB	1.00000	*	1	10.50063	65.6	65.6
N70	1.00000	*	2	1.81623	11.4	77.0
N9	1.00000	*	3	1.66207	10.4	87.4
AC63	1.00000	*	4	1.08529	6.8	94.2
AN89	1.00000	*	5	.49136	3.1	97.2
AC3	1.00000	*	6	.40049	2.5	99.7

PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC1	PC2	PC3	PC4	PC5
AC19	.93335	.13661	-.13222	-.08471	-.21524
AC63	.90719	.00261	-.33287	.20379	.05583
N3	.89313	-.09282	-.34532	-.25057	-.02452
HB	.86902	.05510	-.03209	-.09512	.43564
P47	.86686	-.42747	-.12033	-.16041	-.07561
AC66	.84752	-.45272	-.08864	-.06064	-.19838
AC3	.84371	-.47233	-.08013	-.14253	-.08201
N106	.82109	.33858	.18474	-.37130	.04623
N9	.81682	.10779	-.49015	.24617	.09993
N70	.80708	.12056	-.37159	.37799	.06080
AN42	.79148	.34800	.34687	-.07286	-.32956
AN88	.78351	-.01682	.48592	.38296	-.04736
AN89	.75106	-.01740	.48105	.44228	.07988
AN22	.74384	.32914	.26560	-.46096	.19965
AC12	.64494	-.48868	.55938	.02352	.12117
AN41	.55281	.75199	-.03181	.11436	-.11020

* * * * MULTIPLE REGRESSION * * * *

Dependent Variable.. HB

Method:	Stepwise	Criteria	PIN	.1500	POUT	.3000
AC12	AC19	AC3	AC63	AC66	AN22	AN41
	AN88	AN89	N106	N3	N70	N9
						P47

Variable(s) Entered on Step Number

3.. N70

Multiple R 1.00000

R Square 1.00000

Adjusted R Square .99999

Standard Error 1.16325E-03

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	3	.65425	.21808
Residual	1	.00000	.00000

F = 161167.06407 Signif F = .0018 **

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confidence Interval B	Beta
AC19	-.735245	.003558	-.780458 -.690032	-.852433
N3	1.586686	.003576	1.541250 1.632122	1.944347
N70	-.238210	.002369	-.268315 -.208105	-.255491
Constant	.330604	7.2083E-04	.321445 .339763	

----- in -----

Variable	T	Sig T		
AC19	-206.626	.0031	benzoic acid	(-) **
N3	443.721	.0014	1,3-bis-methylenecyclopentane	(+) **
N70	-100.539	.0063	1-methyl-4-(1-methylethyl)- 1,2-cyclohexanediol	(-) **
Const.	458.642	.0014		

S C A T T E R P L O T

Sample HB ADJPRED

PC1 .86902 .87563

PC2 .05510 .05365

PC3 -.03209 -.02944

PC4 -.09512 -.09164

PC5 .43564 .42772

HCT and 18 compounds
correlating with $|R| > 0.6$

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

Variable	Communality	* PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
HCT	1.00000	* 1	11.88815	62.6	62.6
AC12	1.00000	* 2	2.87280	15.1	77.7
AC19	1.00000	* 3	1.90701	10.0	87.7
AC3	1.00000	* 4	1.34172	7.1	94.8
AC63	1.00000	* 5	.69234	3.6	98.4
AC66	1.00000	* 6	.28802	1.5	99.9
AN19	1.00000	* 7	.00997	.1	100.0
AN22	1.00000	* 8	.00000	.0	100.0

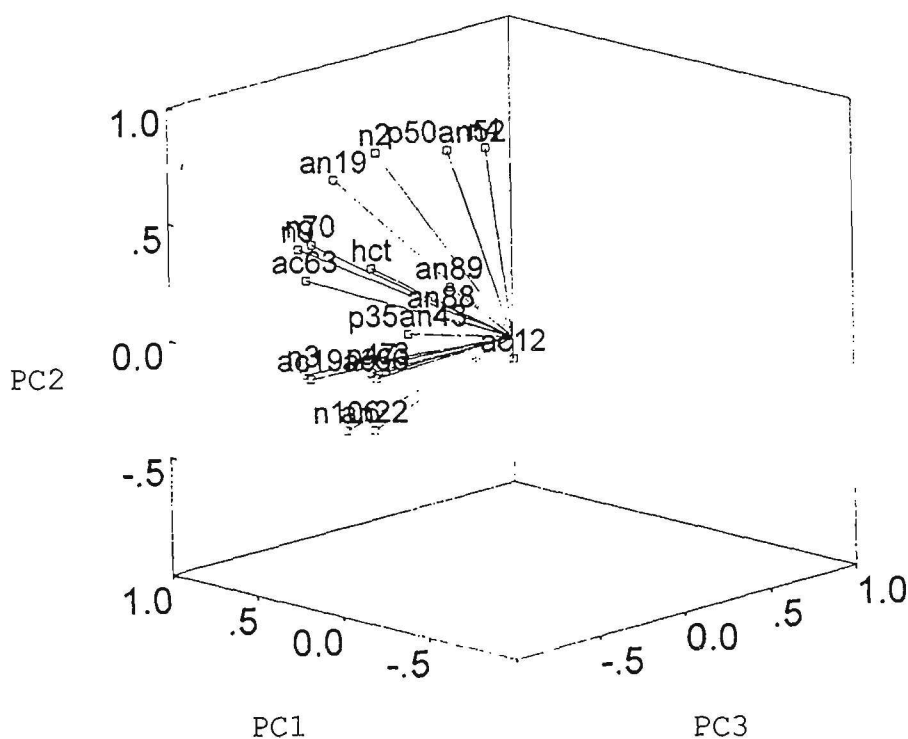
PC extracted 5 factors

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa	PC3loa	PC4loa	PC5loa
AC63	.94040	.12266	-.26110	-.03787	-.08908
HCT	.91107	.10794	.09760	.14536	.34675
N9	.87504	.28683	-.36645	-.09216	-.04653
P35AN43	.87478	-.19958	.26791	-.31795	.02965
P47	.86963	-.32336	.04892	-.36473	.03053
N3	.86288	-.24947	-.35491	-.19713	.12106
AC19	.85904	-.27482	-.31785	.01309	-.15508

N70	.85634	.29917	-.30891	.05325	-.18788
AC3	.85167	-.32879	.11406	-.38329	.01541
AC66	.83676	-.33918	.04323	-.32593	-.14765
AN88	.76284	-.11562	.35244	.38660	-.36189
AN89	.75989	-.00296	.40128	.42058	-.29030
N2	.73312	.66560	-.04942	.07958	.04881
P50AN52	.69868	.60915	.33317	.03832	.16685
N106	.68552	-.47048	-.28334	.44269	.16656
AN19	.66210	.62352	-.36476	.04892	-.11807
AN22	.61877	-.47648	-.18800	.48339	.34615
N4	.58010	.61980	.43881	-.11780	.23845
AC12	.65767	-.34676	.66607	.03846	.01816
SUO	.50688	2.46221	.68765	.39771	.80873
KUNTA	2.45461	-.70236	-1.01125	-.57611	.33799
TCFOLD	-.76048	.05591	-.66571	-.56906	.41077
TCFOHD	.01087	.88490	-1.09697	.50058	-1.73183
TCFBLD	-.83150	-.20267	-.40662	-.58690	.45312
TCFBHD	-.37858	-.42478	.17556	.36288	-1.74430
ECFOLD	-.69508	-.23145	.00093	-.87619	.48237
ECFOHD	.45796	-.49301	2.31644	-.86529	-.58892
ECFBLD	-.78206	-.33503	-.38466	-.21587	.76837
ECFBHD	.01736	-1.01372	.38466	2.42824	.80371
Sample	PC1sco	PC2sco	PC3sco	PC4sco	PC5sco

3D LOADING
PLOT



All 18 compounds were taken into the PC regression

* * * * MULTIPLE REGRESSION * * * *

Dependent Variable.. HCT

Method:	Stepwise	Criteria	PIN	.1500	POUT	.3000
AC12	AC19	AC3	AC63	AC66	AN19	AN22
AN88	N106	N2	NA89	P35AN43	P47	P50AN52

Variable(s) Entered on Step Number

3.. AN88

Multiple R 1.00000

R Square 1.00000

Adjusted R Square 1.00000

Standard Error 5.48231E-04

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	3	.47499	.15833
Residual	1	.00000	.00000
F = 526792.85247		Signif F = .0010 ***	

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confidence Interval B	Beta
AC66	.121890	.001567	.101977 .141804	.171853
AN88	.009070	9.5663E-04	-.003085 .021225	.011697
N3	.585666	.001234	.569989 .601344	.841074
Const.	.296878	3.1807E-04	.292837 .300920	

----- in -----

Variable	T	Sig T		
AC66	77.774	.0082	oleic acid	(+) **
AN88	9.481	.0669	heptacosane	(+) *
N3	474.669	.0013	1,3-bis-methylene cyclopentane	(+) **
Const.	933.383	.0007		

S C A T T E R P L O T

PCNro HCT ADJPRED

PC1 .91107 .91484

PC2 .10794 .10862

PC3 .09760 .09498

PC4 .14536 .14343

PC5 .34675 .34555

MCHC and 15 compounds
correlating with $|R| > 0.5$

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

Variable	Communality	* PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
MCHC	1.00000	* 1	10.39155	64.9	64.9
AC19	1.00000	* 2	2.32098	14.5	79.5
AC3	1.00000	* 3	1.80640	11.3	90.7
AC63	1.00000	* 4	.56055	3.5	94.2
AC66	1.00000	* 5	.52095	3.3	97.5
AN22	1.00000	* 6	.24921	1.6	99.1
AN31	1.00000	* 7	.15036	.9	100.0
AN41	1.00000	* 8	.00000	.0	100.0

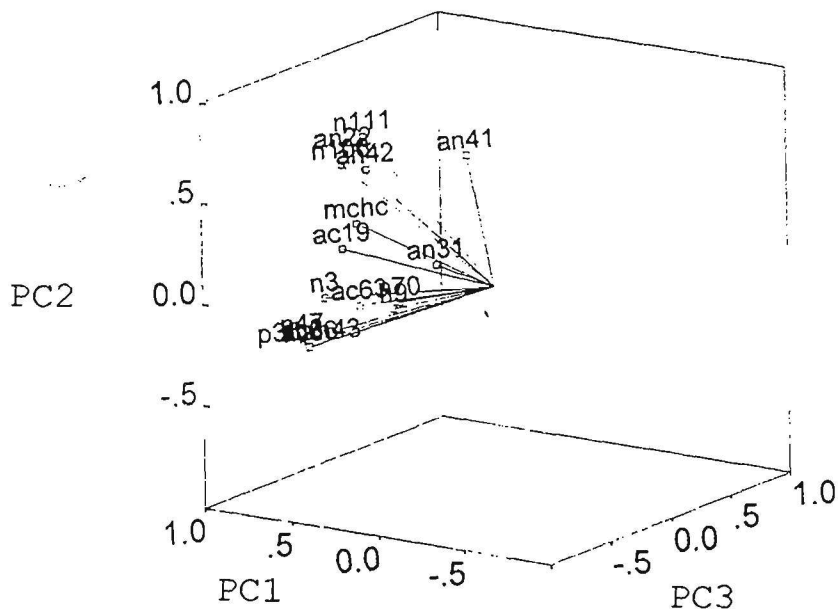
PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa	PC3loa	PC4loa	PC5loa
AC19	.96549	.02569	.12004	.21296	-.05932
N3	.93176	-.16761	-.07818	-.14419	.00205
AC63	.90813	-.25908	.17823	-.25874	-.03257
P47	.87296	-.30169	-.35322	.13866	.01571
N9	.84577	-.31056	.37247	-.12422	.13967
AC3	.84430	-.31602	-.39068	.18184	.01772
AC66	.83311	-.33583	-.35363	-.03515	-.23002

N106	.82399	.50939		-.08475	-.18249	-.07081
P35AN43	.80889	-.31981		-.38930	.18577	.10055
N70	.80126	-.26813		.35967	-.34697	-.07747
MCHC	.79357	.20354		-.00829	.00806	.51688
AN42	.77170	.46376		.04409	.09165	-.37719
AN22	.74388	.59727		-.17808	-.16563	.08111
AN31	.73727	-.12486		.58238	.28230	-.06162
N111	.48573	.76296		-.38875	.00297	.01420
AN41	.59056	.42475		.63310	.23387	.04734
SUO	-.29036		-.82779	.60803	-1.75447	1.11511
KUNTA	2.64871		-.49444	-.21939	-.40865	.00389
TCFOLD	-.62497		-.24947	.31149	.27756	-.02989
TCFOHD	.23530		.07708	2.33648	1.40956	-.22850
TCFBLD	-.68438		-.21493	-.18892	-.19103	.41435
TCFBHD	-.38997		-.12713	-.14584	-.99518	-2.27189
ECFOLD	-.55427		-.29692	-.47989	.33239	1.34903
ECFOHD	.06164		-.76552	-1.58877	1.58446	-.18312
ECFBLD	-.67091		.21200	-.23273	-.05434	-.58576
ECFBHD	.26921		2.68712	-.40046	-.20030	.41678
Sample	PC1sco		PC2sco	PC3sco	PC4sco	PC5sco

3D LOADING
PLOT:



* * * M U L T I P L E R E G R E S S I O N * * * *

Dependent Variable.. MCHC
Method: Stepwise Criteria PIN .1500 POUT .3000
AC19 AC3 AC63 AC66 AN22 AN31 AN41 AN42 N106
N111 N3 N70 N9 P35AN43 P47
Variable(s) Entered on Step Number
2.. AN31
Multiple R .97478
R Square .95019
Adjusted R Square .90037
Standard Error .10936
Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	2	.45627	.22813
Residual	2	.02392	.01196

F = 19.07493 Signif F = .0498 *

```

----- Variables in the Equation -----
Variable      B      SE B      95% Confdnce Intrvl B      Beta
AN31  -.597879  .190931  -1.419396  .223638  -.657711
N3     .949915  .156581  .276195   1.623635  1.274216
(Constant) .368690  .066247  .083647   .653732
----- in -----
Variable      T      Sig T
AN31  -3.131  .0886  thiophene derivative      (-) O
N3     6.067  .0261  1,3-bis-methylene cyclopentane (+) *
Const.  5.565  .0308

S C A T T E R P L O T
PCNro  MCHC  ADJPRED
PC1  .79357  2.01815
PC2  .20354  .36215
PC3 -.00829  -.17625
PC4  .00806  .09003
PC5  .51688  .31270

```

EROD and six compounds
correlating with $|R| > 0.5$

Principal Components Analysis (PC)

```

Initial Statistics:
Variable  Communality * PC  Eigenvalue  Pct of Var  Cum Pct
EROD      1.00000      * 1      5.92913      84.7      84.7
AC2        1.00000      * 2      .70810      10.1      94.8
AC6        1.00000      * 3      .33528       4.8      99.6
N23        1.00000      * 4      .02141       .3      99.9
N48        1.00000      * 5      .00502       .1     100.0
N49        1.00000      * 6      .00105       .0     100.0
N78        1.00000      * 7      .00000       .0     100.0

```

PC extracted 5 factors.

```

PC Matrix:
          PC1loa  PC2loa  PC3loa  PC4loa  PC5loa
N78      .98203  .15563  -.08738  -.01552  -.05897
N48      .97836  .16317  -.12645  .00657  -.00001
N49      .97585  .16548  -.13935  .01395  .01970
N23      .97180  .17171  -.15553  .02067  .03102
AC2      .95065  -.04025  .28702  -.10990  .01332
AC6      .90791  -.14579  .38215  .09163  -.00405
EROD     -.61873  .75994  .19905  .00582  .00071
SUO      -.68958  .24166  -.62076  .23492  .23443
KUNTA    -.59085  .31291  .37217  -2.51564  1.00163
TCFOLD   -.10274  -1.13074  -1.47491  .02023  -.48370
TCFOHD   1.66951  .72816  -1.01879  .62255  1.73761
TCFBLD   -.18077  .19806  -.27516  .13718  -.93825
TCFBHD   1.99103  .05357  .93143  -.64572  -1.49565
ECFOLD   -.59691  -.17111  -.12586  .44024  -.43899
ECFOHD   -.13727  -1.30316  1.94849  .99345  1.06484
ECFBLD   -.87800  2.06702  .61773  .77938  -.41889
ECFBHD   -.48442  -.99636  -.35433  -.06658  -.26303
Sample  PC1sco  PC2sco  PC3sco  PC4sco  PC5sco

```


* * * P C R E G R E S S I O N * * * *

Dependent Variable.. EROD

Method: Stepwise Criteria PIN .1500 POUT .3000
 AC2 AC6 N23 N48 N49 N78

Variable(s) Entered on Step Number

1.. AC6

Multiple R .82645

R Square .68302

Adjusted R Square .57735

Standard Error .32112

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	1	.66658	.66658
Residual	3	.30936	.10312

F = 6.46420 Signif F = .0845

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl B	Beta
AC6	-.978276	.384772	-2.202775 .246224	-.826448
Const.	.310376	.172076	-.237239 .857990	

----- in -----

Variable T Sig T

AC6 -2.542 .0845 2-methyl propanoic acid (-) O

Const. 1.804 .1691

----- Variables not in the Equation -----

Variable	Beta In	Partial	Min Toler	T	Sig T
AC2	.644715	.320902	.078532	.479	.6791
N23	-.104895	-.126174	.458631	-.180	.8738
N48	-.066451	-.076541	.420549	-.109	.9235
N49	-.091133	-.107059	.437454	-.152	.8929
N78	.019460	.021149	.374392	.030	.9789

S C A T T E R P L O T

Sample EROD ADJPRED

PC1 -.61873 -.38038

PC2 .75994 .23000

PC3 .19905 -.14033

PC4 .00582 .28653

PC5 .00071 .44246

* R E G R E S S I O N WITH ORIGINAL DATA (N = 10) * * *

Dependent Variable.. EROD

Method: Stepwise Criteria PIN .1500 POUT .3000
 AC2 AC6 N23 N48 N49 N78

Variable(s) Entered on Step Number

1.. AC6

Multiple R .59595

R Square .35515

Adjusted R Square .27454

Standard Error .97172

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	1	4.16031	4.16031
Residual	8	7.55390	.94424

F = 4.40600 Signif F = .0690 O

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl B	Beta
AC6	-.004069	.001939	-.008540 4.01205E-04	-.595945
c	12.539881	.418668	11.574431 13.505331	

```

----- in -----
Variable          T    Sig T
AC6               -2.099  .0690    2-methyl propanoic acid  (-) O
(Constant)       29.952  .0000

```

```

----- Variables not in the Equation -----
Variable      Beta In  Partial  Min Toler      T    Sig T
AC2           .240623  .074575  .061940      .198  .8488
N23          -.069574  -.052030  .360636     -.138  .8942
N48          -.059290  -.042601  .332917     -.113  .9133
N49          -.067059  -.048994  .344225     -.130  .9004
N78          -.031787  -.021821  .303899     -.058  .9556

```

```

S C A T T E R P L O T
Sample  EROD ADJPRED
SUO     12.50  12.55
KUNTA   12.70  12.35
TCFOLD  10.70  12.50
TCFOHD  11.17  11.23
TCFBLD  12.18  12.13
TCFBHD  10.79  10.11
ECFOLD  12.19  12.31
ECFOHD  11.36  11.33
ECFBLD  14.50  12.07
ECFBHD  11.34  12.36

```

UDP and 28 compounds
correlating with $R > 0.5$

Principal Components Analysis(PC)

```

Initial Statistics:
Variable PC Eigenvalue Pct Var Cum Pct
UDP      1  21.93519    75.6    75.6
AN19     2   2.91549    10.1    85.7
AN56     3   1.91388     6.6    92.3
AN89     4   .88532     3.1    95.3
N107P68A 5   .81198     2.8    98.1
N13      6   .47345     1.6    99.8
N2       7   .06469     .2   100.0
N24      8   .00000     .0   100.0

```

PC extracted 5 factors.

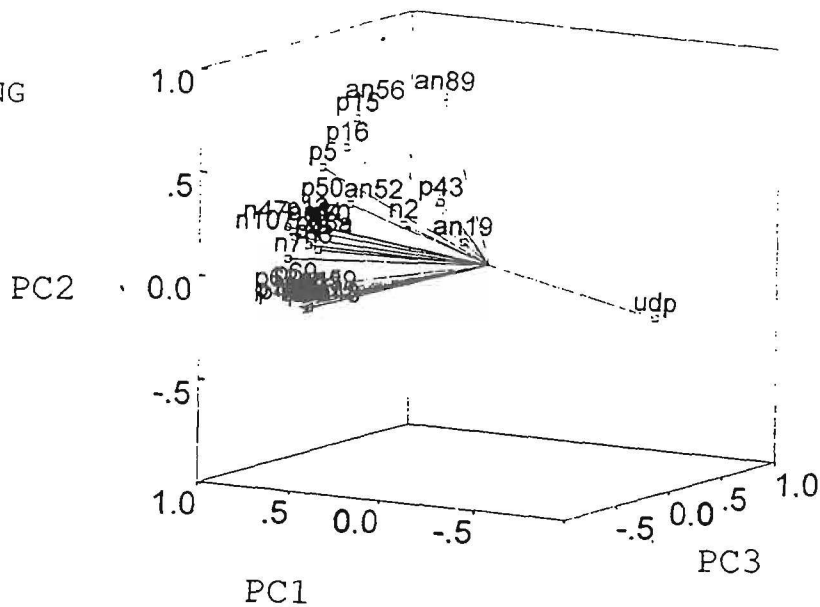
```

PC Matrix:
          PC1loa  PC2loa          PC3loa  PC4loa  PC5loa
P4        .99143  .00314          .02027  .00069  .02432
N107P68A  .97385  .06800        -.14535 -.08882  .09599
P62AN59   .97183  -.22690        -.03079 -.00891  -.05248
P69       .97145  -.18074        -.13679 .05761  .01372
P65       .96367  -.23883        -.04880 .10573  -.01389
N7        .95993  -.02354        -.23123 .08498  .10153
P55       .95960  -.25764        -.09460 .05655  -.02287
P2        .95942  -.25807        -.09481 .05697  -.02402
P41AN48   .95582  -.28966        -.02430 -.00940  -.01595
P36       .95509  -.29043        -.03526 -.00179  -.04413
P56       .95380  -.27689          .02640 -.07826  .01833
N24       .95260  -.28730        -.07551 .05231  -.03945
P11AN15   .94145  -.26619        -.08762 .10851  -.10060
N6        .93989  -.01632          .02513 -.22721  .22591

```

N47AN3	.93718	.13965	-.27747	-.02220	-.06032
UDP	-.93094	-.16369	-.03484	.13700	.03698
P70	.92151	.07380	.09944	-.33940	-.05185
P5	.90558	.38996	.00367	.07590	-.13766
N4	.89284	.09643	.03371	.37581	.15553
N13	.89242	-.23392	-.02299	-.05203	-.10461
P50AN52	.89149	.17749	.25453	.26190	.10142
P12	.84930	.15919	-.24183	-.15045	-.39678
N2	.78941	.04323	.57613	.14079	.15146
P16	.61976	.54999	-.26437	-.13800	.46905
P43	.59748	.16819	.57712	-.48701	-.14758
AN56	.57504	.73184	-.07985	.24828	-.14357
AN89	.44786	.72639	.33869	.18131	-.35131
P15	.50610	.71745	-.36418	-.17257	.18542
AN19	.57979	-.04764	.76204	.03333	.22301
SUO	2.70244	-.84915	-.19433	.14426	-.13004
KUNTA	-.19056	.29316	2.02235	1.92399	.12123
TCFOLD	-.55160	-.84500	-.11882	-.35977	.64442
TCFOHD	.06808	.52205	1.44173	-1.85434	.82987
TCFBLD	-.62868	-.85066	-.54503	.12501	.19545
TCFBHD	-.36110	.43585	-.70809	.72917	-1.36799
ECFOLD	-.52626	-.53780	-.65012	.15263	.70745
ECFOHD	.32133	2.22548	-1.16050	.24622	1.00925
ECFBLD	-.63848	-.89457	-.36607	-.07127	.09437
ECFBHD	-.19518	.50063	.27888	-1.03590	-2.10401
Sample	PC1sco	PC2sco	PC3sco	PC4sco	PC5sco

3D LOADING
PLOT:



* M U L T I P L E R E G R E S S I O N * * * *

Dependent Variable.. UDP

Method: Stepwise Criteria PIN .1500 POUT .3000

AN19 AN56 AN89 N107P68A N13 N2 N24 N4 N47AN3 N6

N7 P11AN15 P12 P15 P16 P2 P36 P4 P41AN48 P43

P5 P50AN52 P55 P56 P62AN59 P65 P69 P70

Variable(s) Entered on Step Number

2.. N47AN3

Multiple R .99833

R Square .99665

Adjusted R Square .99331

Standard Error .03501

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	2	.72975	.36488
Residual	2	.00245	.00123
F =	297.76780	Signif F = .0033 **	

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl B	Beta
N47AN3	-.349341	.073157	-.664114 -.034569	-.382143
P70	-.592296	.072856	-.905773 -.278819	-.650588
Const.	-.057678	.016594	-.129075 .013720	

----- in -----

Variable	T	Sig T		
N47AN3	4.775	.0412	benzothiazole	(-) *
P70	-8.130	.0148	pentacosane	(-) *
Const.	-3.476	.0737		

----- Variables not in the Equation -----

Variable	Beta In	Partial	Min Toler	T	Sig T
AN19	-.012948	-.110223	.064570	-.111	.9297
AN56	-.055429	-.677412	.159962	-.921	.5262
AN89	-.054856	-.884105	.256243	-1.892	.3095
N107P68A	.321943	.902956	.026329	2.101	.2828
N13	-.002490	-.016795	.152285	-.017	.9893
N2	-.033961	-.298572	.095891	-.313	.8070
N24	.014481	.115581	.176394	.116	.9263
N4	-.005696	-.037719	.081624	-.038	.9760
N6	.175495	.929609	.093916	2.522	.2403
N7	.129139	.584910	.053661	.721	.6023
P11AN15	-.005448	-.043924	.161281	-.044	.9720
P12	-.197592	-.968082	.080343	-3.863	.1613
P15	.014096	.183684	.193546	.187	.8824
P16	.048951	.618742	.202255	.788	.5753
P2	.019287	.146124	.161455	.148	.9066
P36	.015224	.118208	.196484	.119	.9246
P4	.015508	.062064	.053610	.062	.9605
P41AN48	.021843	.170850	.202463	.173	.8907
P43	-.212218	-.913125	.019090	-2.240	.2673
P5	-.163650	-.921603	.105791	-2.374	.2538
P50AN52	-.077291	-.491408	.135298	-.564	.6730
P55	.019610	.148475	.161492	.150	.9051
P56	.034199	.254429	.170921	.263	.8362
P62AN59	.010482	.071937	.157633	.072	.9542
P65	.010651	.085026	.168934	.085	.9458
P69	.037689	.242938	.123209	.250	.8438

S C A T T E R P L O T

Sample	UDP	ADJPRED
PC1	-.93094	-.92949
PC2	-.16369	-.14642
PC3	-.03484	.06720
PC4	.13700	.18807
PC5	.03698	-.02008

LIPID and 11 compounds
correlating with $|R| > 0.5$

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

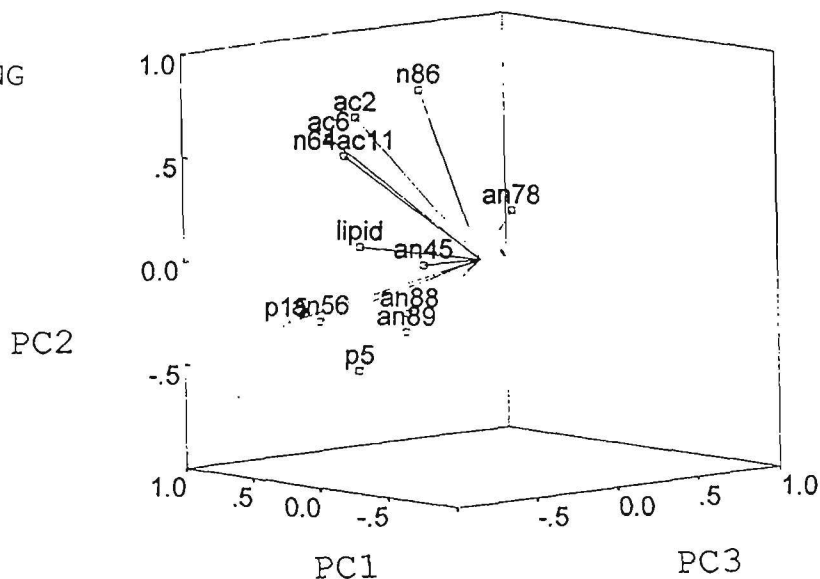
Variable	Communality	* PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
LIPID	1.00000	* 1	6.89393	57.4	57.4
AC2	1.00000	* 2	2.38221	19.9	77.3
AC6	1.00000	* 3	1.45163	12.1	89.4
AN45	1.00000	* 4	.56075	4.7	94.1
AN56	1.00000	* 5	.28496	2.4	96.4
AN78	1.00000	* 6	.24630	2.1	98.5
AN88	1.00000	* 7	.18022	1.5	100.0
AN89	1.00000	* 8	.00000	.0	100.0
N64AC11	1.00000	* 9	.00000	.0	100.0

PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa	PC3loa	PC4loa	PC5loa
AN56	.88336	-.35778	-.24736	-.02343	.05321
LIPID	.85493	-.01905	-.01956	.19187	-.45141
AN88	.83477	-.36675	.26130	-.27921	-.04810
AN89	.83233	-.45390	.24084	-.16776	-.01835
AN45	.82043	-.13994	.34200	-.06502	.20807
N64AC11	.75755	.44484	-.18929	.40707	.14829
AC2	.74349	.62727	-.12970	-.17523	-.01248
AC6	.73101	.54941	-.30338	-.24311	.02815
P5	.69074	-.58645	-.17014	.35495	.08139
N86	.62068	.74343	.16062	.04111	-.00573
AN78	.61496	.10777	.71725	.13387	.03579
P15	.64684	-.30379	-.65797	-.10927	.03913
SUO	.48279		-1.42889	-.40057	2.31465
KUNTA	.23685		-.50448	1.49102	-.56117
TCFOLD	-1.07265		.48806	-.24140	.19448
TCFOHD	.61341		.84710	-.06366	-.24804
TCFBLD	-.89297		.67287	-.22902	.22102
TCFBHD	1.70341		1.75880	-.02257	.41336
ECFOLD	-.93397		.07795	-.59603	.17740
ECFOHD	.84790		-1.17381	-1.78695	-1.59956
ECFBLD	-1.33169		.15365	.13627	-.42168
ECFBHD	.34692		-.89126	1.71293	-.49046
Sample	PC1sco	PC2sco	PC3sco	PC4sco	PC5sco

3D LOADING
PLOT



* * * M U L T I P L E R E G R E S S I O N * * * *

Dependent Variable.. LIPID

Method: Stepwise Criteria PIN .1500 POUT .3000

AC2 AC6 AN45 AN56 AN78 AN88 AN89 N64AC11 N86 P15 P5

Variable(s) Entered on Step Number

1.. AN56

Multiple R .75556
 R Square .57088
 Adjusted R Square .42783
 Standard Error .36083

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	1	.51963	.51963
Residual	3	.39060	.13020
F =	3.99098	Signif F = .1396 -	

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl B	Beta
AN56	.738058	.369445	-.437665 1.913781	.755563
Const.	.065892	.162967	-.452734 .584517	

----- in -----

Variable	T	Sig T	
AN56	1.998	.1396	(acetyl-dihydroxy-dimethyl- benzofuranyl)-pentanedione (+) -
Constant	.404	.7131	

----- Variables not in the Equation -----

Variable	Beta In	Partial	Min Toler	T	Sig T
AC2	.280840	.378506	.779489	.578	.6215
AC6	.185523	.239949	.717837	.350	.7601
AN45	-.021569	-.017642	.287083	-.025	.9824
AN78	.327662	.465703	.866860	.744	.5343
AN88	.203939	.176492	.321391	.254	.8235
AN89	.171092	.134830	.266499	.192	.8652
N64AC11	.370511	.423989	.561941	.662	.5760
N86	.385828	.575225	.953829	.994	.4248
P15	-.513852	-.295690	.142095	-.438	.7043
P5	-.097666	-.072165	.234287	-.102	.9278

S C A T T E R P L O T

Sample LIPID ADJPRED

PC1	.85493	-.63341
PC2	-.01905	-.31001
PC3	-.01956	-.15831
PC4	.19187	.01107
PC5	-.45141	.24437

LIITE 3.

Sinisimpukan kasvun ja yhdisteiden pitoisuuksien monimuuttuja-analyysi

Sample	BMG95
SUO	.379
KUNTA	.272
TCFOLD	.262
TCFOHD	.409
TCFBLD	.308
TCFBHD	.407
ECFOLD	.304
ECFOHD	.228
ECFBLD	.229
ECFBHD	.372

BMG95 and 10 compound groups
correlating with $R > 0.4$

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

Variable	Communality	*	PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
BMG95	1.00000	*	1	6.26319	56.9	56.9
ALA	1.00000	*	2	2.46896	22.4	79.4
AMD	1.00000	*	3	1.26517	11.5	90.9
NIT	1.00000	*	4	.56191	5.1	96.0
P	1.00000	*	5	.22307	2.0	98.0
PAD	1.00000	*	6	.21031	1.9	99.9
PHD	1.00000	*	7	.00738	.1	100.0
SHC	1.00000	*	8	.00000	.0	100.0

PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa	PC3loa	PC4loa	PC5loa
STI	.99729	.05817	-.00172	.02956	.01303
P	.99531	.06218	-.00298	.04756	.04423
NIT	.99432	.06546	.00040	.01729	-.05995
PAD	.99406	.08656	-.00992	.04743	.03338
PHD	.98877	.07298	-.02739	-.04039	-.08120
TER	.98551	.11535	.02216	.10915	.04541
UHC	.20047	.82417	.25340	-.34859	-.19524
BMG95	-.49955	.77523	.04851	.03843	-.16366
AMD	-.21357	.70623	-.34269	.55891	-.02286
SHC	-.12620	.51359	.79891	.08021	.27404
ALA	-.03078	.62331	-.66450	-.31761	.25895
SUO	-.47086		.64759	2.21724	-.45676
KUNTA	-.31797		-.26982	.58415	-1.05783
TCFOLD	-.34512		-.89702	-.65484	.11163
TCFOHD	-.41214		1.65275	-1.74804	-1.05012
TCFBLD	-.42043		-.74473	-.24901	.79608
TCFBHD	-.52522		1.37707	.15449	2.14624
ECFOLD	.20586		-.81915	-.24391	.41339
ECFOHD	2.78679		.29413	.09318	.07800
ECFBLD	-.27817		-1.32515	-.29155	.08384
ECFBHD	-.22274		.08434	.13830	-1.06445
Sample	OC1sco	PC2sco	PC3sco	PC4sco	PC5sco

* * * M U L T I P L E R E G R E S S I O N * * * *

Dependent Variable.. **BMG95**
 Method: Stepwise Criteria PIN .2000 POUT .4000
 ALA AMD NIT P PAD PHD SHC STI TER UHC

Variable(s) Entered on Step Number

3.. UHC

Multiple R .99937

R Square .99874

Adjusted R Square .99494

Standard Error .03324

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	3	.87212	.29071
Residual	1	.00110	.00110
F =	263.18276	Signif F = .0453 *	

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl B	Beta
AMD	.716623	.036725	.249984 1.183262	.719636
SHC	.683981	.052089	.022126 1.345835	.530261
UHC	.268812	.041887	-.263414 .801037	.262937
Const.	-.308746	.021550	-.582559 -.034932	

----- in -----

Variable	T	Sig T		
AMD	19.513	.0326	amides	(+) *
SHC	13.131	.0484	saturated hydrocarbons	(+) *
UHC	6.418	.0984	unsaturated hydrocarbons	(+) O
Const.	-14.327	.0444		

S C A T T E R P L O T

PCNro BMG95 ADJPRED

PC1 -.49955 -.29214

PC2 .77523 .55619

PC3 .04851 .14275

PC4 .03843 .11456

PC5 -.16366 -.20532

BMG95 and 18 compounds
 correlating with $|R| > 0.5$

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

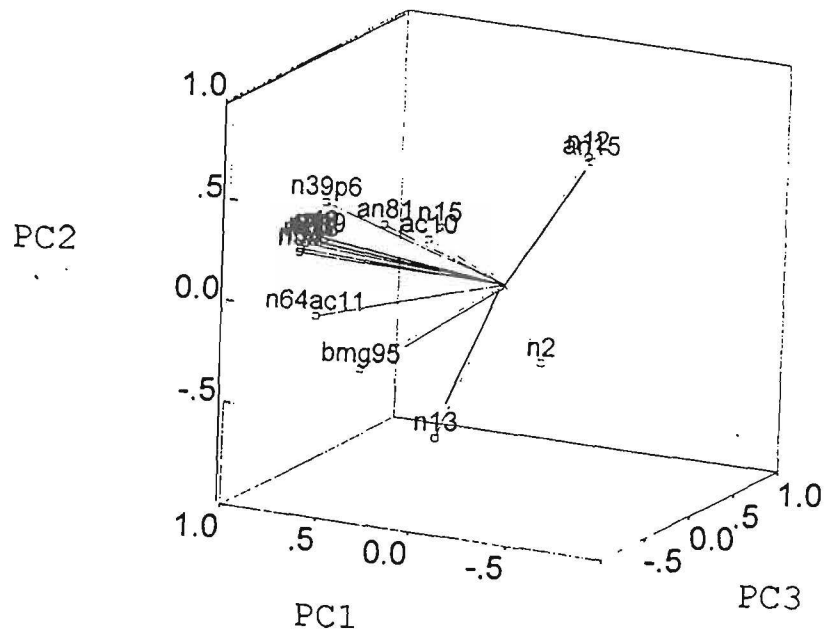
Variable	Communality	*	PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
BMG95	1.00000	*	1	12.66347	66.6	66.6
AC10	1.00000	*	2	2.14710	11.3	78.0
AN15	1.00000	*	3	1.88340	9.9	87.9
AN81	1.00000	*	4	1.78471	9.4	97.3
N12	1.00000	*	5	.32242	1.7	99.0
N13	1.00000	*	6	.15332	.8	99.8
N15	1.00000	*	7	.04556	.2	100.0
N19	1.00000	*	8	.00000	.0	100.0

PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC11oa	PC21oa	PC31oa	PC41oa	PC51oa
N23	.99621	.06935	.00975	.02093	-.04347
N33	.99357	.08953	-.05431	.00714	-.03133
N49	.99328	.10635	.00414	-.00373	-.03545
N48	.99301	.10729	-.02104	-.00448	-.03207
N19	.99191	.07498	.08502	.01725	-.05165
N78	.98829	.10967	-.09625	-.00670	-.02185
N44	.97515	.11166	-.18469	-.00928	-.00955
N39P6	.94442	.28296	-.01461	.11751	-.01208
N53	.94417	.11288	-.30283	-.01267	.00734
N54	.91906	.11279	-.37034	-.01458	.01725
AN81	.85605	.07260	.49933	.01153	-.09688
N64AC11	.75928	-.15138	-.50463	.37087	.01043
BMG95	.72774	-.50956	-.02262	.08834	.43757
AC10	.69141	-.00808	.64587	-.14649	.23775
N13	.27046	-.76020	-.12963	.51976	-.14547
N12	-.39898	.68015	.02221	.59903	.09461
AN15	-.41254	.65716	.03424	.62261	.09215
N15	.67174	.03656	.72397	.02398	-.12193
N2	-.02894	-.46282	.36877	.76513	-.05073
SUO	-.33671	-2.28008	-.22690	1.48278	-.39267
KUNTA	-.70244	.45765	.29486	1.04468	.08525
TCFOLD	-.13357	.06934	.30791	-.83846	-1.23196
TCFOHD	1.93514	.11175	1.99391	.22144	-.09565
TCFBLD	-.12883	-.05346	-.51558	-.83117	-.25961
TCFBHD	1.76905	.28169	-2.08388	.09440	.28325
ECFOLD	-.60192	.13962	-.11567	-.55033	.33313
ECFOHD	-.72650	1.78432	-.05714	1.38654	.17470
ECFBLD	-.63033	.02610	-.00500	-1.08564	-1.23897
ECFBHD	-.44390	-.53693	.40748	-.92424	2.34254
Sample	PC1sco	PC2sco	PC3sco	PC4sco	PC4sco

3D LOADING
PLOT:



* * * * * M U L T I P L E R E G R E S S I O N * * * * *

Dependent Variable.. BMG95
 Method: Stepwise Criteria PIN .1500 POUT .3000
 AC10 AN15 AN81 N12 N13 N15 N19 N2 N23 N33
 N39P6 N44 N48 N49 N53 N54 N64AC11 N78

Variable(s) Entered on Step Number

3.. AN15

Multiple R .99996

R Square .99991

Adjusted R Square .99965

Standard Error 8.74186E-03

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	3	.88486	.29495
Residual	1	.00008	.00008
F =	3859.63243	Signif F =	.0118 *

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce	Intrvl B	Beta
AC10	-1.671768	.029089	-2.041380	-1.302155	-1.341358
AN15	4.000027	.235239	1.011035	6.989020	3.807737
N12	-6.191998	.236071	-9.191563	-3.192433	-5.855104
Const.	1.059038	.013478	.887787	1.230288	

----- in -----

Variable	T	Sig T		
AC10	-57.470	.0111	hexanoic acid	(-) *
AN15	17.004	.0374	tetradecane	(+) *
N12	-26.229	.0243	2,3-dimethyl-2-cyclopenten-1-one	(-) *
Const.	78.577	.0081		

S C A T T E R P L O T

Sample BMG95 ADJPRED

PC1 .72774 .70983

PC2 -.50956 -.61508

PC3 -.02262 .03400

PC4 .08834 .06401

PC5 .43757 .44884

LIITE 4.

Kolmipiikin rakennemuuttujien ja yhdisteiden
pitoisuuksien monimuuttuja-analyysi

Sample	SBMORT	SBJUV96	SBJUVG95	SBJUVG96
SUO	48.00	73.00	.804	.103
KUNTA	53.00	173.00	.758	.097
TCFOLD	75.00	118.00	1.050	.092
TCFOHD	77.00	175.00	.795	.123
TCFBLD	87.00	92.00	.800	.107
TCFBHD	58.00	145.00	.741	.073
ECFOLD	30.00	144.00	.814	.056
ECFOHD	89.00	134.00	.811	.094
ECFBLD	77.00	258.00	.900	.060
ECFBHD	83.00	144.00	.829	.071

Four stickleback effects and
eight compound groups

Principal Components Analysis (PC)

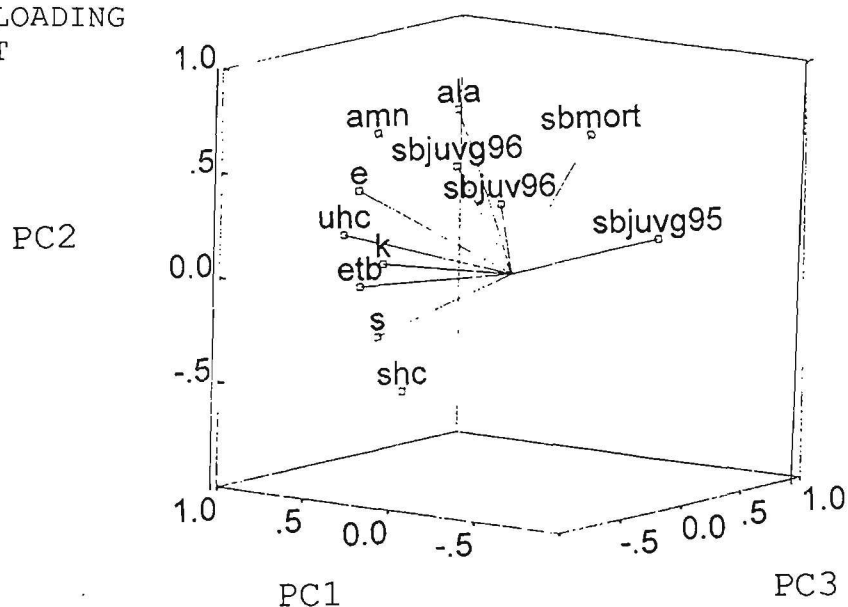
Initial Statistics:

Variable	Communality	*	PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
SBMORT	1.00000	*	1	5.12296	42.7	42.7
SBJUV96	1.00000	*	2	2.44378	20.4	63.1
SBJUVG95	1.00000	*	3	1.35931	11.3	74.4
SBJUVG96	1.00000	*	4	1.02293	8.5	82.9
ALA	1.00000	*	5	.73478	6.1	89.0
AMN	1.00000	*	6	.56708	4.7	93.8
E	1.00000	*	7	.42247	3.5	97.3
ETB	1.00000	*	8	.25371	2.1	99.4
K	1.00000	*	9	.07297	.6	100.0
S	1.00000	*	10	.00000	.0	100.0

PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa		PC3loa	PC4loa	PC5loa
K	.87612	-.07843		.18934	.19519	-.03793
ETB	.84191	-.15240		-.04547	.00924	.32701
E	.83604	.31390		-.07736	.39289	-.11421
S	.81144	-.40193		.05624	.37975	-.15986
UHC	.78110	.13292		-.27490	-.30506	-.21176
SHC	.65763	-.64493		.04746	-.22220	.02402
SBJUVG96	.65371	.37912		.47153	-.28756	.15516
ALA	.33140	.74959		.02064	-.31471	.35283
AMN	.60216	.63832		-.26104	.25587	.01410
SBMORT	-.11120	.61471		.48256	-.07524	-.54434
SBJUV96	-.36389	.45711		-.62216	.21868	.04335
SBJUVG95	-.44948	.14434		.56883	.49300	.30895
SUO	1.59605		-1.87213	.73827	-.02207	.54761
KUNTA	.72711		.14958	-1.28983	.29066	.32093
TCFOLD	-.81031		.31971	1.70542	.85589	1.12517
TCFOHD	.93739		1.93940	-.12008	-1.02069	1.20444
TCFBLD	-.66784		-.04983	1.29897	-1.00574	-.73715
TCFBHD	-.32586		-.65104	-.80347	-1.45159	-.48619
ECFOLD	-.70289		-.78779	-1.01828	.74764	.93194
ECFOHD	1.14262		.71578	.21327	1.41740	-1.81093
ECFBLD	-1.29374		.22323	-.67108	.94170	-.12820
ECFBHD	-.60252		.01308	-.05320	-.75319	-.96760
Sample	PC1sco		PC2sco	PC3sco	PC4sco	PC5sco

3D LOADING
PLOT

SBJUVG96 AND 41 COMPOUNDS CORRELATING WITH
|R| > 0.5

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

Variable	Communality	* PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
SBJUVG96	1.00000	* 1	33.57431	79.9	79.9
AC14	1.00000	* 2	4.34862	10.4	90.3
AC18	1.00000	* 3	1.79652	4.3	94.6
AC22	1.00000	* 4	1.20640	2.9	97.4
AC24	1.00000	* 5	.56564	1.3	98.8
AC25	1.00000	* 6	.37584	.9	99.7
AC26	1.00000	* 7	.13266	.3	100.0
AC27	1.00000	* 8	.00000	.0	100.0

PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa	PC3loa	PC4loa	PC5loa
AC30	.99586	-.03522	-.07957	.00797	-.02226
AC24	.99538	-.04354	-.08029	.00394	-.02314
N62	.99521	-.03734	-.08028	.00778	-.03024
N80	.99516	-.03724	-.07911	.00601	-.03452
AC27	.99516	-.03724	-.07911	.00601	-.03452
AN30	.99516	-.03724	-.07911	.00601	-.03452
AC22	.99516	-.03724	-.07911	.00601	-.03452
AC52	.99516	-.03724	-.07911	.00601	-.03452
N81	.99516	-.03724	-.07911	.00601	-.03452
P30	.99516	-.03724	-.07911	.00601	-.03452
AC50	.99516	-.03724	-.07911	.00601	-.03452
N65	.99516	-.03724	-.07911	.00601	-.03452
P34	.99516	-.03724	-.07911	.00601	-.03452
AC26	.99516	-.03724	-.07911	.00601	-.03452
AC32	.99516	-.03724	-.07911	.00601	-.03452
AN39	.99516	-.03724	-.07911	.00601	-.03452
P27	.99516	-.03724	-.07911	.00601	-.03452
AN21	.99516	-.03724	-.07911	.00601	-.03452
AN37	.99516	-.03724	-.07911	.00601	-.03452

N83	.99516	-.03724		-.07911	.00601	-.03452
AC67	.99516	-.03724		-.07911	.00601	-.03452
N21	.99505	-.04693		.01143	.05280	-.06376
AC14	.99445	-.04967		-.08101	.00208	-.02548
AC18	.98991	-.07265		-.08570	-.00738	-.06324
P58	.98534	-.05637		-.12312	-.00979	-.06931
AN81	.96509	-.19932		.16488	.00091	-.03690
P38AC46	.95612	-.01707		.03066	-.02540	.13805
AN63	.95244	.08819		-.12084	-.09981	-.12143
N87	.92212	-.04503		-.17123	.13971	.29376
N63AN20	.83957	-.04134		-.19306	.19728	.43685
AN40	.83565	.34585		.07022	-.41341	.07283
AC25	.80980	.37027		.08077	-.43959	.08006
N19	.76598	-.38854		.50956	.01707	-.04848
N39P6	.68269	-.45940		.51915	.08504	.19486
N33	.66711	-.44568		.59539	.00716	-.04172
N78	.63267	-.47183		.61315	-.00970	-.03134
SBJUVG96	.62247	.42822		.18043	.20456	.27344
N2	.28200	.90326		.22190	.18014	-.09487
N9	.32729	.84017		.26616	-.33406	.03900
AN19	.53368	.78934		.25110	-.01815	-.16606
N1	.58287	.76822		.16280	.01460	.16554
N6	.29420	.54419		.11341	.75853	-.14631
SUO	-.32175	1.65060		.62043	1.91407	-1.10566
KUNTA	-.23096	1.81742		.67379	-2.00843	.49636
TCFOLD	.15954	-.30411		-.59717	-.12463	-.21608
TCFOHD	2.79406	-.04494		-.10523	.04199	-.05481
TCFBLD	-.42649	-.47446		.00875	.04986	.33248
TCFBHD	-.24256	-1.46220		2.34761	-.05929	-.08801
ECFOLD	-.48945	-.42188		-.80593	-.16529	-.38035
ECFOHD	-.32227	.04930		-.45239	1.01496	2.47728
ECFBLD	-.50142	-.46232		-.84479	-.36161	-.81421
ECFBHD	-.41871	-.34741		-.84508	-.30163	-.64700
Sample	PC1sco	PC2sco	PC3sco	PC4sco	PC5sco	

SBJUVG96 and 15 compounds
selected by PCA of 41

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

Variable	Communality	*	PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
SBJUVG96	1.00000	*	1	9.19460	57.5	57.5
N21	1.00000	*	2	4.16197	26.0	83.5
AN81	1.00000	*	3	1.23552	7.7	91.2
P38AC46	1.00000	*	4	.76536	4.8	96.0
AN63	1.00000	*	5	.41045	2.6	98.5
AN40	1.00000	*	6	.15772	1.0	99.5
AC25	1.00000	*	7	.07439	.5	100.0
N19	1.00000	*	8	.00000	.0	100.0

PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa	PC3loa	PC4loa	PC5loa
N21	.92421	-.19440	-.02805	-.29949	.04365
P38AC46	.91557	-.17034	-.11534	-.25687	.04757
AN81	.91217	-.36547	-.01514	-.15697	.03042
AN40	.89085	.19010	-.40559	.04515	-.01120
AN63	.88693	-.04020	-.21317	-.36235	.11098
AC25	.87556	.21532	-.42214	.07546	-.01422
N19	.78313	-.57691	.15685	.15571	.03327
N1	.74368	.63258	.04199	.07323	.00841

AN19	.71907	.64940		.09135	.14486	.10035
SBJUVG96	.71508	.29524		.20314	-.09347	-.58995
N33	.70367	-.63240		.19006	.25275	.02872
N39P6	.69707	-.63673		.19953	.17361	-.03394
N78	.67223	-.65620		.18343	.28201	.02331
N2	.49303	.80510		.27020	.11187	.11914
N9	.55864	.71747		-.18664	.37070	.01953
N6	.37466	.48652		.73461	-.25139	.12779
SUO	.07370		1.61110	2.17685	-.09888	.52333
KUNTA	.42220		1.64166	-1.47258	1.71475	-.18025
TCFOLD	-.09934		-.21060	-.33108	-.46762	-.58969
TCFOHD	2.58689		-.44448	-.24895	-.90528	.20229
TCFBLD	-.49870		-.39638	.08918	-.04761	-2.19209
TCFBHD	.14349		-1.78073	.90818	1.89602	.44414
ECFOLD	-.80329		-.18825	-.41518	-.22349	1.19100
ECFOHD	-.39338		.15936	.47107	-.53179	-.86492
ECFBLD	-.81684		-.22536	-.56661	-.36050	.90780
ECFBHD	-.61473		-.16634	-.61087	-.97560	.55840
Sample	PC1sco		PC2sco	PC3sco	PC4sco	PC5sco

SBJUVG98 and eight compounds selected from
PCA of 41

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

Variable	Communality	* PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
SBJUVG96	1.00000	* 1	6.21508	69.1	69.1
AC25	1.00000	* 2	1.53630	17.1	86.1
AN19	1.00000	* 3	.75529	8.4	94.5
AN40	1.00000	* 4	.38349	4.3	98.8
AN63	1.00000	* 5	.07615	.8	99.6
N1	1.00000	* 6	.03369	.4	100.0
N2	1.00000	* 7	.00000	.0	100.0
N6	1.00000	* 8	.00000	.0	100.0

PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa	PC3loa	PC4loa	PC5loa
N1	.96697	.13625	-.08005	-.00212	-.19342
AN19	.95912	.19052	-.11713	.07119	.12755
N9	.87589	.07244	-.46765	-.08164	.04035
AC25	.86253	-.49667	-.07155	.01486	-.04528
AN40	.86011	-.50348	-.02893	.02815	-.04886
N2	.84763	.49077	-.15350	.07301	.06801
SBJUVG96	.76252	.03233	.39712	-.50809	.03906
AN63	.71077	-.48676	.41328	.27292	.08027
N6	.55147	.70511	.39805	.18102	-.06174
SUO	.88743		2.53410	.38111	.44143
KUNTA	1.34348		-.33799	-2.36269	-.68465
TCFOLD	-.19787		-.41356	.37182	-.42725
TCFOHD	1.89411		-1.30185	1.40827	.63190
TCFBLD	-.59264		-.16949	.66222	-2.07677
TCFBHD	-.78428		-.20236	-.15904	-.00729
ECFOLD	-.80359		-.06778	-.55331	1.12968
ECFOHD	-.28338		.57301	.42999	-.77435
ECFBLD	-.82591		-.24740	-.38938	.92879
ECFBHD	-.63733		-.36668	.21100	.83850
Sample	PC1sco		PC2sco	PC3sco	PC4sco

* * * M U L T I P L E R E G R E S S I O N * * * *

5 PCs taken from PCA of SBJUVG96 and 41 compounds

Dependent Variable.. SBJUVG96

Method: Stepwise Criteria PIN .1500 POUT .3000

AC25 AN19 AN40 AN63 AN81 N1 N19 N2
N21 N33 N39P6 N6 N78 N9 P38AC46

Variable(s) Entered on Step Number

1.. AN63

Variable(s) Entered on Step Number

3.. N1

Multiple R .99999

R Square .99998

Adjusted R Square .99990

Standard Error 1.83431E-03

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	3	.13579	.04526
Residual	1	.00000	.00000

F = 13452.30907 Signif F = .0063 **

----- Variables in the Equation-----

Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl B	Beta
AN63	1.677535	.039251	1.178807 2.176263	4.213393
N1	-.289277	.014991	-.479756 -.098798	-.502697
N21	-1.256924	.035131	-1.703306 -.810542	-3.087487
Const.	.443925	.006269	.364270 .523581	

----- in -----

Variable	T	Sig T	
AN63	42.739	.0149	uncosane, methyl- (+) *
N1	-19.297	.0330	diethyl ether (-) *
N21	-35.778	.0178	nonanal (-) *
Const.	70.812	.0090	

S C A T T E R P L O T

Sample SBJUVG96 ADJPRED

PC1 .62247 .59071

PC2 .42822 .43650

PC3 .18043 .17547

PC4 .20456 .20707

PC5 .27344 .26995

* * * M U L T I P L E R E G R E S S I O N * * * *

5 PCs formed by PCA of SBJUVG96 and 15 selected compounds

Dependent Variable.. SBJUVG96

Method: Stepwise Criteria PIN .1500 POUT .3000

AC25 AN19 AN40 AN63 AN81 N1 N19 N2
N21 N33 N39P6 N6 N78 N9 P38AC46

Variable(s) Entered on Step Number

2.. AN19

Multiple R .98000

R Square .96040

Adjusted R Square .92079

Standard Error .13646

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	2	.90312	.45156
Residual	2	.03724	.01862
F =	24.25053	Signif F = .0396 *	

----- Variables in the Equation-----

Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl	B	Beta
AN19	-15.881933	3.977112	-32.994255 1.230389	-10.316152	
N1	15.070464	3.506229	-.015787 30.156715	11.103723	
Const.	1.001035	.317232	-.363918 2.365988		

----- in -----

Variable	T	Sig T	
AN19	-3.993	.0574	pentadecane (-) O
N1	4.298	.0501	diethyl ether (+) O
Constant	3.156	.0875	

----- Variables not in the Equation -----

Variable	Beta In	Partial	Min Toler	T	Sig T
AC25	-.162851	-.460169	.002934	-.518	.6956
AN40	-.179856	-.513444	.002960	-.598	.6567
AN63	-.273461	-.949367	.002673	-3.022	.2035
AN81	-.220019	-.818000	.001973	-1.422	.3902
N19	-.157635	-.602449	.001724	-.755	.5884
N2	.178189	.454449	.002787	.510	.6997
N21	-.268128	-.924498	.002046	-2.425	.2490
N33	-.134505	-.512664	.001708	-.597	.6573
N39P6	-.151693	-.545364	.001519	-.651	.6328
N6	-.036529	-.151072	.002166	-.153	.9035
N78	-.124627	-.478416	.001737	-.545	.6824
N9	.386714	.772706	.001516	1.217	.4378
P38AC46	-.252590	-.887353	.002267	-1.924	.3051

End Block Number 1 PIN = .150 Limits reached.

S C A T T E R P L O T

Sample SBJUVG96 ADJPRED

PC1	.71508	.97596
PC2	.29524	.09688
PC3	.20314	.11851
PC4	-.09347	-.24227
PC5	-.58995	-.29176

By MULTIPLE REGRESSION with 5 PC's from SBJUVG96 and eight variables selected from PCA, no significant results were obtained.

The other stickleback variables had only few strong correlations $R > 0.5$: SBMORT three, SBJUV95 two and SBJUVG95 three cases.

LIITE 5.

Sedimentin biomassan ja yhdisteiden
pitoisuuksien monimuuuttuja-analyysiSediment biomass growth parameters (8)
and 16 substance groups**Principal Components Analysis (PC)**

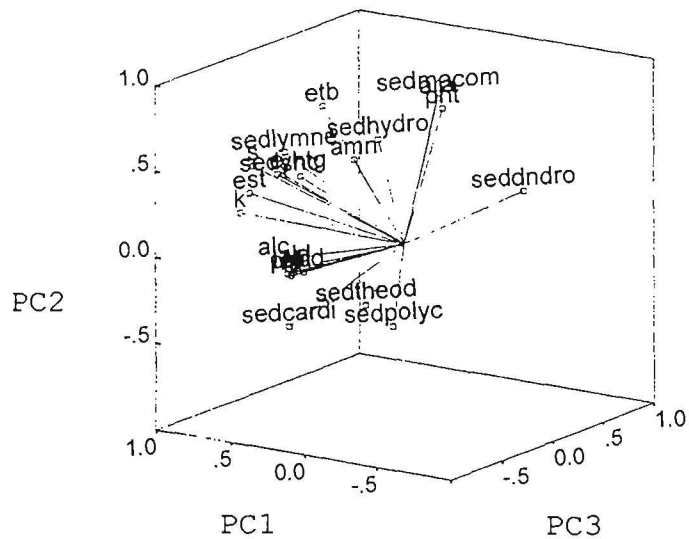
Initial Statistics:

PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
1	10.50912	43.8	43.8
2	4.86891	20.3	64.1
3	4.03402	16.8	80.9
4	2.31775	9.7	90.5
5	1.20848	5.0	95.6
6	.55463	2.3	97.9
7	.32160	1.3	99.2
8	.12917	.5	99.8
9	.05633	.2	100.0
10	.00000	.0	100.0

PC extracted 6 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa		PC3loa	PC4loa	PC5loa	PC6loa
ALC	.95335	-.24985		.07710	-.10835	.09642	-.02649
TER	.91059	-.33897		.15056	-.10525	.08430	-.09819
E	.91003	.26268		.04896	.05844	-.28389	.06991
PAD	.90878	-.34563		.18609	-.10362	.07516	-.05407
RA	.90669	-.35675		.18366	-.10364	.00332	-.05190
ALD	.90390	-.32115		.21613	-.12825	-.10236	.06365
STI	.90375	-.34434		.20299	-.10294	.10062	-.04547
PHD	.87389	-.34967		.26183	-.15703	.12018	.05990
EST	.85121	.23717		-.30539	-.21003	.19446	.19678
K	.76745	.18550		-.52021	-.16210	-.16734	.21931
S	.74739	.43670		-.42244	-.02187	.24606	-.01077
AMN	.64589	.29867		.43773	.19492	-.49665	.02682
YHTG	.64155	.36737		-.27298	.58124	-.05290	-.16167
CARDI	.52915	-.47277		-.38555	.41252	-.35214	.04491
ETB	.32556	.82863		-.34371	.08124	-.16260	.20997
MACOM	.02812	.78632		.37593	.39948	.08890	-.21762
ARA	.19259	.68296		.60478	.23618	-.25918	.06014
PHT	.15440	.63088		.59885	-.06224	.24997	.25367
LYMNE	.48106	.57183		-.49577	.00973	.33414	-.14342
DNDRO	-.22234	.15278		.84414	-.04689	.30252	.29039
SHC	.22184	.51881		-.71671	-.16607	.18788	-.00488
HYDRO	.58943	.39132		.59325	.02514	.14037	-.31799
POLYC	-.00213	-.45346		-.11510	.82492	.24609	.18846
THEOD	.26720	-.39397		.00204	.81525	.29700	.08546
SUO	.45670	1.23957	-2.36189	-.33540	.60059	.41940	
KUNTA	.15680	2.17099	1.28152	1.07282	.08740	-.74632	
TCFOLD	-.53277	-.50294	-.25936	-.02699	-1.16704	-1.12741	
TCFOHD	.01429	.12144	.04393	-.02909	-2.31204	1.37564	
TCFBLD	-.82779	-.38059	.11735	-.68352	.38470	-.65212	
TCFBHD	-.55023	-.31292	-.34076	-.37490	.05487	-.84827	
ECFOLD	.07823	-1.22486	-.31476	2.36931	.65657	.61851	
ECFOHD	2.56222	-.72199	.58276	-.71506	.17032	-.36289	
ECFBLD	-.71326	-.46146	.20216	-.33300	.48774	-.47160	
ECFBHD	-.64418	.07276	1.04906	-.94415	1.03690	1.79505	
Sample	PC1sco	PC2sco	PC3sco	PC4sco	PC5sco	PC6sco	

3D LOADING
PLOT

* * * MULTIPLE REGRESSION * * * *

Dependent variable DNDRO

----- Variables not in the Equation -----

Variable	Beta In	Partial	Min Toler	T	Sig T
ALC	-.086183	-.400401	.180388	-.437	.7377
ALD	-.058487	-.359645	.307274	-.385	.7658
AMN	-.101557	-.760636	.458145	-1.172	.4498
ARA	-.195357	-.973985	.323387	-4.298	.1455
E	-.100071	-.597570	.368390	-.745	.5923
EST	.129908	.385759	.097102	.418	.7479
K	.046102	.168429	.214572	.171	.8923
PAD	-.090171	-.448160	.210915	-.501	.7042
PHD	-.054711	-.279705	.223516	-.291	.8195
RA	-.085043	-.454696	.242030	-.511	.6995
SHC	.229728	.740083	.166843	1.100	.4696
STI	-.089811	-.438567	.204680	-.488	.7110
TER	-.103131	-.490115	.192406	-.562	.6739

Variable(s) Entered on Step Number

4.. ARA

Multiple R	.99959
R Square	.99917
Adjusted R Square	.99587
Standard Error	.02357

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	4	.67217	.16804
Residual	1	.00056	.00056

F = 302.57377 Signif F = .0431 *

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl B	Beta
ARA	-.204808	.047652	-.810287 .400670	-.195357
ETB	-.254603	.045192	-.828823 .319616	-.284653
PHT	.999828	.051436	.346268 1.653388	.727074
S	-.463951	.043156	-1.012304 .084402	-.515471
Const.	.082942	.017385	-.137959 .303844	

----- in -----

Variable	T	Sig T	
ARA	-4.298	.1455	aromatic acids (-) -
ETB	-5.634	.1118	ethyl bezene (-) -
PHT	19.438	.0327	phtalates (+) *
S	-10.750	.0590	sulfur compounds (-) O
Const.	4.771	.1315	

SCATTER PLOT
 PCNro DNDRO ADJPRED
 PC1 -.22234 -.28124
 PC2 .15278 .22704
 PC3 .84414 .64673
 PC4 -.04689 .01699
 PC5 .30252 .35457
 PC6 .29039 .25235

Dependent Variable.. YHTG

Variable(s) Entered on Step Number

1.. S
 Multiple R .68366
 R Square .46739
 Adjusted R Square .33424
 Standard Error .32335

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	1	.36700	.36700
Residual	4	.41821	.10455
F =	3.51022	Signif F = .1343	-

----- Variables in the Equation -----
 Variable B SE B 95% Confdnce Intrvl B Beta
 S .664788 .354826 -.320352 1.649927 .683661
 Const. .075733 .144051 -.324209 .475675

----- in -----

Variable	T	Sig T	
S	1.874	.1343	sulfur compounds (+) -
Constant	.526	.6269	

Dependent variable HYDRO -> NONSIGNIFICANT

Dependent Variable.. LYMNE

Variable(s) Entered on Step Number

1.. SHC
 Multiple R .94012
 R Square .88383
 Adjusted R Square .85479
 Standard Error .15627

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	1	.74318	.74318
Residual	4	.09768	.02442
F =	30.43307	Signif F = .0053	**

----- Variables in the Equation -----
 Variable B SE B 95% Confdnce Intrvl B Beta
 SHC .911410 .165212 .452716 1.370104 .940124
 Constant .120053 .063807 -.057099 .297206

----- in -----

Variable	T	Sig T	
SHC	5.517	.0053	saturated hydrocarbons (+) **
Constant	1.882	.1330	

Dependent Variable.. MACOM

Variable(s) Entered on Step Number

1.. ARA

Multiple R .74459

R Square .55442

Adjusted R Square .44302

Standard Error .26268

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	1	.34343	.34343
Residual	4	.27601	.06900
F =	4.97702	Signif F = .0895	O

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl B	Beta
ARA	.749063	.335764	-.183151 1.681277	.744592
Constant	.054075	.136791	-.325711 .433860	

----- in -----

Variable	T	Sig T	
ARA	2.231	.0895	aromatic acids (+) O
(Constant)	.395	.7128	

Dependent Variable.. THEOD

Variable(s) Entered on Step Number

3.. E

----- Variables not in the Equation -----

Variable	Beta In	Partial	Min Toler	T	Sig T
ALC	.111537	.779873	.218079	1.246	.4306
ALD	.071700	.485463	.174520	.555	.6773
AMN	-.335381	-.998477	.028573	-18.101	.0351
ARA	-.130092	-.760865	.147706	-1.173	.4496
EST	.259586	.970898	.073425	4.054	.1540
ETB	-.067773	-.503291	.183991	-.582	.6642
PAD	.095810	.724267	.206647	1.050	.4844
PHD	.073840	.622092	.238597	.795	.5726
RA	.095307	.681142	.187423	.930	.5230
S	.135315	.739949	.128606	1.100	.4697
SHC	.045792	.268028	.089655	.278	.8273
STI	.093316	.725086	.213471	1.053	.4836
TER	.103387	.774638	.207209	1.225	.4359

Variable(s) Entered on Step Number

4.. AMN

Multiple R .99999

R Square .99998

Adjusted R Square .99988

Standard Error 4.36456E-03

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	4	.79486	.19871
Residual	1	.00002	.00002
F =	10431.53980	Signif F = .0073	**

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl B	Beta
AMN	-.338786	.018716	-.576597 -.100974	-.335381
E	.812074	.028886	.445043 1.179104	.814182
K	-.810493	.015893	-1.012431 -.608556	-.899497
PHT	-1.528086	.008038	-1.630222 -1.425949	-1.022283
Const.	.605568	.003335	.563198 .647938	

----- in -----					S C A T T E R P L O T		
Variable	T	Sig T			PCNro	THEOD	ADJPRED
AMN	-18.101	.0351	amines	(-) *	PC1	.26720	.29835
E	28.113	.0226	ethers	(+) *	PC2	-.39397	-.40098
K	-50.997	.0125	ketones	(-) *	PC3	.00204	.01455
PHT	-190.100	.0033	phtalates	(-) **	PC4	.81525	.80450
Const.	181.602	.0035			PC5	.29700	-.01446
					PC6	.08546	.09335

Dependent Variable.. CARDI

Variable(s) Entered on Step Number

2.. AMN

Multiple R .98434

R Square .96893

Adjusted R Square .94821

Standard Error .09867

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	2	.91079	.45540
Residual	3	.02921	.00974
F =	46.77575	Signif F = .0055 **	

----- Variables in the Equation -----					
Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl B	Beta	
AMN	.583764	.113242	.223384 .944144	.531418	
PHT	-1.491509	.167570	-2.024783 -.958235	-.917562	
Constant	.308744	.065721	.099595 .517894		

----- in -----				
Variable	T	Sig T		
AMN	5.155	.0142	amines	(+) *
PHT	-8.901	.0030	phtalates	(-) **
Constant	4.698	.0182		

Dependent Variable.. POLYC

Variable(s) Entered on Step Number

3.. ARA

Multiple R .99992

R Square .99985

Adjusted R Square .99962

Standard Error 8.33125E-03

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	3	.91624	.30541
Residual	2	.00014	.00007
F =	4400.15099	Signif F = .0002 ***	

----- Variables in the Equation -----					
Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl B	Beta	
ARA	-.134082	.014153	-.194978 -.073185	-.109580	
EST	-.498168	.009434	-.538758 -.457577	-.476891	
PHT	-1.430113	.018108	-1.508025 -1.352200	-.891057	
Constant	.663882	.005866	.638640 .689123		

----- in -----				
Variable	T	Sig T		
ARA	-9.474	.0110	aromatic acids	(-) *
EST	-52.807	.0004	esters	(-) ***
PHT	-78.977	.0002	phtalates	(-) ***
Constant	113.167	.0001		

YHTG and 11 compounds
correlating with $|R| > 0.6$

Sample	YHTG
SUO	2358.00
KUNTA	2445.00
TCFOLD	1767.00
TCFOHD	1666.00
TCFBLD	1169.00
TCFBHD	1470.00
ECFOLD	2256.00
ECFOHD	2216.00
ECFBLD	1264.00
ECFBHD	988.00

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

Variable	PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
SEDYHTG	1	6.68047	55.7	55.7
AC17	2	2.36242	19.7	75.4
AC3	3	1.70793	14.2	89.6
N1	4	.65341	5.4	95.0
N2	5	.28196	2.3	97.4
N4	6	.18182	1.5	98.9
P10	7	.13199	1.1	100.0
P22AN33	8	.00000	.0	100.0

PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa	PC3loa	PC4loa	PC5loa
SEDYHTG	.89465	-.17429	-.01862	-.15683	.17960
P35AN43	.84689	.39680	-.32537	.11565	.01392
P50AN52	.81181	.18128	.53609	-.13243	-.01014
AC17	.80535	.27651	-.26284	-.37250	-.10946
N4	.79401	.09667	.46457	-.35623	.03783
N1	.79160	-.12076	.30698	.47064	-.01541
P22AN33	.77933	.33444	-.52099	.05837	-.01779
AC3	.76684	.35333	-.44960	.21499	.09258
N2	.76224	.00950	.60086	.23568	.02177
P10	-.65273	.59425	.11211	-.01886	.43423
AC13	-.26224	.92935	.20194	.00349	-.13401
P53	-.57178	.76664	.21733	.07212	-.14101
SUO	1.08314		-.32763	2.33316	-1.09828
KUNTA	1.64972		.74119	-.58999	1.47041
TCFOLD	-.39393		-.99407	-.30830	.02025
TCFOHD	.07190		-.97048	.58574	1.83577
TCFBLD	-.73515		-.66070	-.43741	-.15379
TCFBHD	-.93333		.31021	-.11689	-.29061
ECFOLD	-.06308		-.70367	-.67924	-.75956
ECFOHD	1.25077		.74337	-1.23025	-1.21131
ECFBLD	-.73873		-.31403	-.27442	-.12025
ECFBHD	-1.19130		2.17581	.71759	.30736
Sample	PC1sco	PC2sco	PC3sco	PC4sco	PC5sco

* * M U L T I P L E R E G R E S S I O N * * * *

Dependent Variable.. YHTG

Method: Stepwise Criteria PIN .1500 POUT .3000
AC13 AC17 AC3 N1 N2 N4 P10 P22AN33 P35AN43 P50AN52 P53

Variable(s) Entered on Step Number

3.. P35AN43

Multiple R .99998

R Square .99997

Adjusted R Square .99986

Standard Error 5.19678E-03

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	3	.78296	.26099
Residual	1	.00003	.00003
F =	9663.87253	Signif F = .0075 **	

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl B	Beta
AC13	2.183872	.035940	1.727217 2.640528	2.318004
P35AN43	-.264314	.013010	-.429624 -.099004	-.262876
P53	-2.833185	.036803	-3.300816 -2.365554	-3.142703
Const.	.072252	.002809	.036562 .107941	

----- in -----

Variable	T	Sig T	
AC13	60.765	.0105	dimethyl hexanoic acid (+) *
P35AN43	-20.316	.0313	octadecane (-) *
P53	-76.982	.0083	palmitic acid (-) **
Constant	25.723	.0247	

S C A T T E R P L O T

PCNro YHTG ADJPRED

PC1 .89465 .92121

PC2 -.17429 -.20851

PC3 -.01862 -.00604

PC4 -.15683 -.14188

PC5 .17960 .17314

MACOM and 11 compounds
correlating with $|R| > 0.6$

Sample	MACOM
SUO	951.00
KUNTA	1886.00
TCFOLD	865.00
TCFOHD	841.00
TCFBLD	934.00
TCFBHD	894.00
ECFOLD	925.00
ECFOHD	829.00
ECFBLD	757.00
ECFBHD	917.00

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

Variable	PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
SEDMACOM	1	9.17690	76.5	76.5
AC19	2	1.23266	10.3	86.7
AC3	3	1.04046	8.7	95.4
AC63	4	.25844	2.2	97.6
AC66	5	.15810	1.3	98.9
AN22	6	.12124	1.0	99.9
N106	7	.01219	.1	100.0
N3	8	.00000	.0	100.0

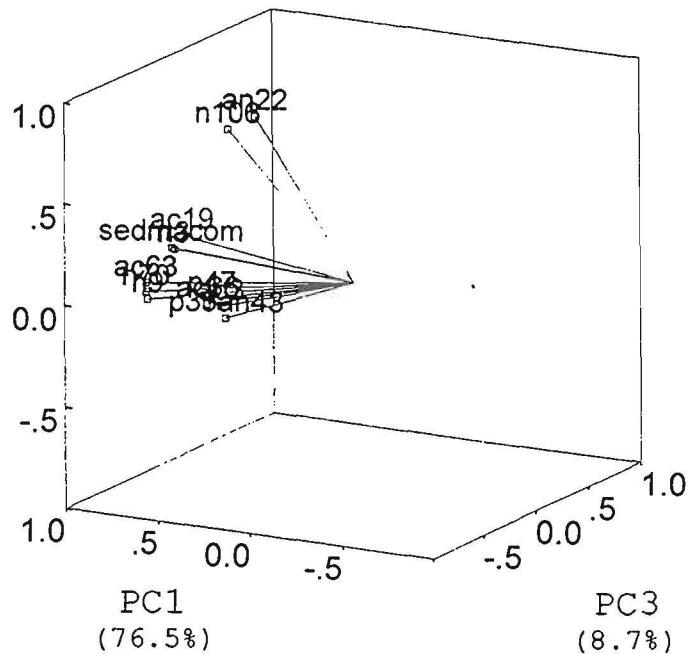
PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa	PC3loa	PC4loa	PC5loa
N3	.96659	.04990	-.00821	-.16564	-.17595
MACOM	.95182	.06917	-.05617	-.23115	-.14005
AC63	.93027	-.03311	-.34982	-.02695	.10091
P47	.92429	-.25995	.27550	.01687	-.03579
AC19	.92235	.11951	-.00756	.26186	-.13840
AC66	.89971	-.26230	.19133	-.21046	.12424
AC3	.89708	-.30407	.31629	.04663	-.01178
P35AN43	.85613	-.35030	.28975	.17394	.12128
N9	.85330	-.07541	-.47022	.16588	-.08939
N70	.81426	-.01457	-.55455	-.02636	.16650
N106	.75801	.62743	.14945	-.01271	.07639
AN22	.67326	.67742	.25949	.05382	.07129
SUO	-.13941		-.44441	-1.66661	-.01652
KUNTA	2.75014		.12617	-.02987	-.47545
TCFOLD	-.56460		-.08542	-.07794	-.13892
TCFOHD	-.09530		.02485	-1.47502	1.83302
TCFBLD	-.58830		-.09340	.13488	-.98053
TCFBHD	-.30737		-.06566	-.36220	-1.56829
ECFOLD	-.49446		-.42558	.52872	-.44948
ECFOHD	.15546		-1.73005	1.61033	1.14222
ECFBLD	-.60687		.35580	.42096	-.02864
ECFBHD	-.10929		2.33770	.91676	.68259
Sample	PC1sco	PC2sco	PC3sco	PC4sco	PC5sco

3D LOADING
PLOT

PC2
(10.3%)



* * MULTIPLE REGRESSION * * * *

Dependent Variable.. MACOM
Method: Stepwise Criteria PIN .1500 POUT .3000
AC19 AC3 AC63 AC66 AN22 N106 N3 N70 N9 P35AN43 P47
Variable(s) Entered on Step Number
1.. N3
Multiple R .99595
R Square .99193
Adjusted R Square .98923
Standard Error .04967

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	1	.90907	.90907
Residual	3	.00740	.00247
F =	368.53400	Signif F = .0003 ***	

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl B	Beta
N3	1.001496	.052169	.835475 1.167518	.995955
Const.	-.014814	.023275	-.088884 .059257	

----- in -----

Variable	T	Sig T	
N3	19.197	.0003	1,3-bis-methylene cyclopentane (+) ***
Const.	-.636	.5697	

----- Variables not in the Equation -----

Variable	Beta In	Partial	Min Toler	T	Sig T
AC19	-.140465	-.615381	.154980	-1.104	.3846
AC3	-.093733	-.578741	.307828	-1.004	.4213
AC63	.075236	.398398	.226414	.614	.6016
AC66	.001964	.010821	.245169	.015	.9892
AN22	.051457	.393189	.471444	.605	.6068
N106	.087169	.566909	.341530	.973	.4331
N70	.067253	.484390	.418885	.783	.5156
N9	-.003536	-.022725	.333443	-.032	.9773
P35AN43	-.068538	-.509596	.446384	-.838	.4904
P47	-.107436	-.578603	.234198	-1.003	.4214

S C A T T E R P L O T

PCNro	MACOM	ADJPRED
PC1	.95182	.99314
PC2	.06917	.02625
PC3	-.05617	-.01358
PC4	-.23115	-.15922
PC5	-.14005	-.21346

LYMNEA/sediment and 21 compounds
correlating with $|R| > 0.6$

Sample	LYMNE
SUO	816.00
KUNTA	470.00
TCFOLD	95.00
TCFOHD	82.00
TCFBLD	230.00
TCFBHD	120.00
ECFOLD	188.00
ECFOHD	426.00
ECFBLD	258.00
ECFBHD	61.00

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

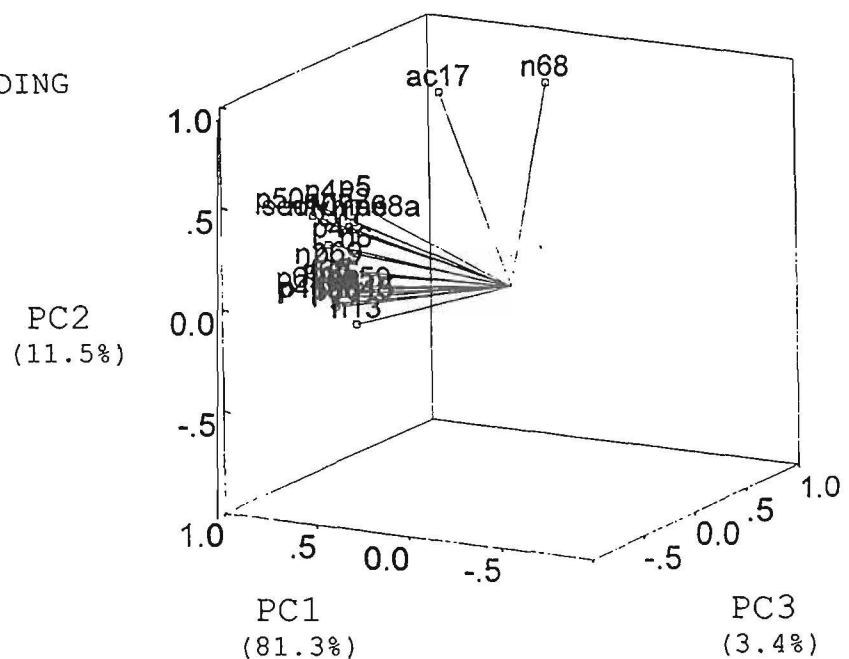
Variable	PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
SEDLYMNE	1	17.89492	81.3	81.3
AC17	2	2.52628	11.5	92.8
N107P68A	3	.75449	3.4	96.3
N13	4	.48432	2.2	98.5
N2	5	.21048	1.0	99.4
N24	6	.10871	.5	99.9
N4	7	.02081	.1	100.0
N6	8	.00000	.0	100.0

PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa	PC3loa	PC4loa	PC5loa
P69	.98884	-.05399	.09921	-.09265	.01137
P65	.98842	-.11318	-.00398	-.09854	.00311
P62AN59	.98445	-.16459	.04573	.00260	-.00266
P4	.98399	.09242	.00355	.07282	.01870
P55	.98285	-.14463	.05926	-.09483	.00958
P2	.98270	-.14579	.05935	-.09484	.00817
N24	.97772	-.18197	.04324	-.09221	.00886
P41AN48	.97594	-.20960	.03853	-.01350	.04364
P36	.97540	-.21068	.03927	-.03312	.02541
N7	.96808	.14039	.17500	-.10915	.01444
P56	.96721	-.22321	.03971	.07576	.08345
P11AN15	.96555	-.20835	.04064	-.08451	-.10402
N107P68A	.95756	.15660	.20080	.08203	.04874
N6	.92140	.01797	.15366	.29077	.18968
N4	.90994	.33144	-.19706	-.14134	-.02239
N13	.89720	-.31592	.10662	.14896	-.13346
P50AN52	.88622	.32012	-.31805	.07528	-.02367
SEDLYMNE	.86270	.27124	-.24363	-.31332	.03743
P5	.85696	.30257	.03384	.23825	-.33561
N2	.78461	.10805	-.51719	.30498	.10580
AC17	.35717	.92372	-.03379	-.11733	-.01998
N68	.01594	.91178	.39029	.08566	.07965
SUO	2.77590		-.55775	.10581	-.25951
KUNTA	-.09505		.70674	-2.71514	-.21591
TCFOLD	-.48369		-.54558	.27833	-.10481
TCFOHD	-.13296		-.27477	-.02208	2.51776
TCFBLD	-.51256		-.55192	.21460	-.92965
TCFBHD	-.40727		-.59579	.52943	.13695
ECFOLD	-.41920		.04192	.44943	-.67829
ECFOHD	.16480		2.60778	.99871	-.01848
ECFBLD	-.50082		-.48401	.07210	-.96299
ECFBHD	-.38913		-.34663	.08881	.51492
Sample	PC1sco	PC2sco	PC3sco	PC4sco	PC5sco

3D LOADING
PLOT



* * * M U L T I P L E R E G R E S S I O N * * * *

Dependent Variable.. LYMNE
 Method: Stepwise Criteria PIN .1500 POUT .3000
 AC17 N107P68A N13 N2 N24 N4 N6 N68 N7 P11AN15 P2
 P36 P4 P41AN48 P5 P50AN52 P55 P56 P62AN59 P65 P69

Variable(s) Entered on Step Number

2.. P5
 Multiple R .99793
 R Square .99586
 Adjusted R Square .99172
 Standard Error .04319

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	2	.89752	.44876
Residual	2	.00373	.00187
F =	240.61285	Signif F = .0041 **	

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl B	Beta
N4	1.255580	.082188	.901950 1.609209	1.213656
P5	-.304383	.086727	-.677544 .068778	-.278820
Const.	-.031525	.022198	-.127036 .063986	

----- in -----

Variable	T	Sig T	
N4	15.277	.0043	2-methyl 2-pentanethiol (+) **
P5	-3.510	.0725	propanetriol dicaetate II (-) O
Const.	-1.420	.2914	

----- Variables not in the Equation -----

Variable	Beta In	Partial	Min Toler	T	Sig T
AC17	-.023802	-.300206	.263425	-.315	.8059
N107P68A	.126631	.799275	.164890	1.330	.4104
N13	.049068	.503623	.245288	.583	.6640
N2	-.075869	-.736382	.237165	-1.088	.4731
N24	.071209	.636319	.228850	.825	.5609
N6	.031935	.303339	.280764	.318	.8038
N68	-.006414	-.099561	.327659	-.100	.9365
N7	.141530	.935187	.162144	2.641	.2305
P11AN15	.076132	.660994	.256367	.881	.5403
P2	.077254	.667780	.221936	.897	.5345
P36	.060012	.564104	.246924	.683	.6184
P4	.080839	.446371	.126190	.499	.7054
P41AN48	.056621	.538854	.248370	.640	.6377
P50AN52	-.230539	-.898960	.062932	-2.052	.2886
P55	.077294	.667581	.221336	.897	.5347
P56	.043463	.440241	.267631	.490	.7098
P62AN59	.063159	.558768	.249655	.674	.6225
P65	.079235	.618177	.194184	.786	.5757
P69	.093716	.744089	.204449	1.114	.4658

S C A T T E R P L O T

PCNro	LYMNE	ADJPRED
PC1	.86270	.77424
PC2	.27124	.29904
PC3	-.24363	-.32088
PC4	-.31332	-.23291
PC5	.03743	.08540

Pearson correlation coefficients $|R| > 0.5$

	SEDCARDI		SEDCARDI		SEDCARDI
AC39	.5424	N16	.5438	P17	.5077
AC51	.5051	N22	.5106	P23AN11	.5115
AN22	-.6444*	N38	.5351	P51	.5501
AN24	.5220	N63AN20	.5261	P53	-.5075
AN55	-.5398	N67	.4913	P54	.5614
AN71	.5423	N68	.5415	P61	.5640
AN76	.5849	N73	.5591	P64	.5844
N103AC74	.5455	N89	.5375	P66	.5528
N104	.5142	N93	.5273	P67	.5503
N106	-.6495*	P14	.5900	P71AN80	-.6328*
N109AN79	.6899*	P15	.5269	P72	.5410
N111	-.5094	P16	.6007	P73	.5618

CARDI/sediment and 36 compounds $|R| > 0.5$

Sample	CARDI
SUO	588.00
KUNTA	58.00
TCFOLD	803.00
TCFOHD	739.00
TCFBLD	.00
TCFBHD	447.00
ECFOLD	1090.00
ECFOHD	930.00
ECFBLD	232.00
ECFBHD	.00

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

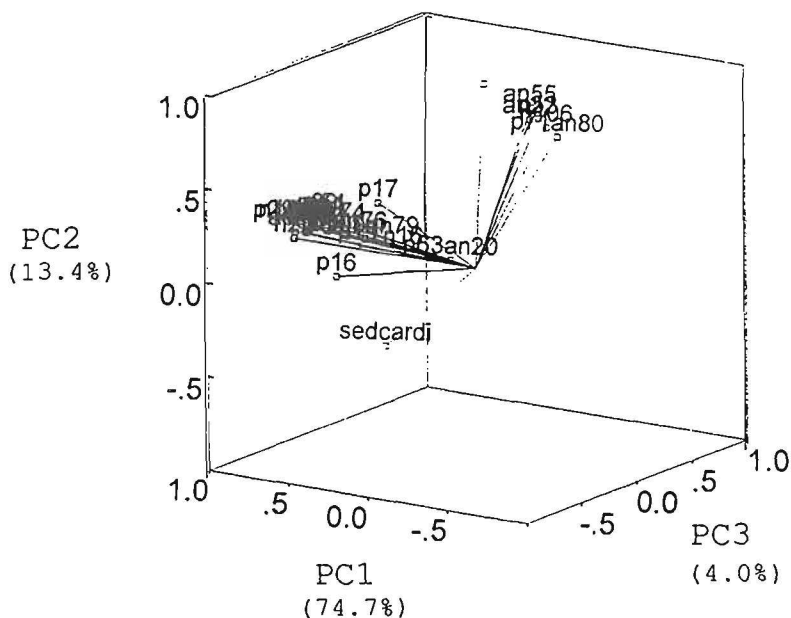
Variable	PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
SEDCARDI	1	26.88488	74.7	74.7
AC39	2	4.81765	13.4	88.1
AC51	3	1.45037	4.0	92.1
AN22	4	1.04093	2.9	95.0
AN24	5	.86782	2.4	97.4
AN55	6	.57136	1.6	99.0
AN71	7	.35186	1.0	100.0
AN76	8	.01513	.0	100.0
N103AC74	9	.00000	.0	100.0
N104	10	.00000	.0	100.0

PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa	PC3loa	PC4loa	PC5loa
P61	.99580	.07283	-.01556	.00312	-.04307
P54	.99541	.07634	-.02553	.00192	-.04071
P64	.99345	.03967	.07758	.01426	-.06487
P73	.99344	.08724	.05005	.01802	-.03806
P67	.99343	.09801	-.03709	.00672	-.03112
P66	.99333	.08748	-.05738	-.00190	-.03312
N103AC74	.99227	.09917	-.05151	-.01842	-.00806
N73	.99046	.07056	-.10878	-.02768	-.00557
N89	.99009	.13112	-.00525	.02609	-.02139
AC39	.98956	.09969	-.09258	-.00613	-.02466
AN71	.98953	.09978	-.09284	-.00616	-.02459
N68	.98920	.10066	-.09538	-.00647	-.02398
P72	.98895	.10130	-.09722	-.00669	-.02353

P51	.98822	.11470	.07264	.03935	-.03531
N93	.98643	.13313	-.08739	.00686	-.01216
N38	.98623	.10766	-.11570	-.00891	-.01906
N104	.97433	.12820	-.17593	-.01618	-.00433
P23AN11	.97336	.13267	-.17771	-.01631	-.00115
AN24	.97064	.09439	-.08924	-.11261	.07554
P14	.96456	-.01754	.22411	-.09369	.01950
AC51	.95333	.11670	-.26955	-.05178	.03764
N22	.93787	.09024	-.29940	-.07663	.06499
AN76	.93304	-.02278	.30307	.01677	-.18370
P17	.89726	.12859	.41596	.01371	.05307
P16	.84423	-.15456	-.05202	-.13121	.07350
P15	.83088	-.02616	.12565	-.29165	.33890
N16	.79896	-.12855	.49432	-.21524	.10716
CARDI	.61932	-.51735	.06581	.38029	.11487
N111	-.06405	.99183	.00017	.07847	-.02032
AN55	-.28738	.87114	.09551	.26722	.18559
AN22	-.35530	.84392	-.01367	.00200	-.36773
P53	-.29508	.80155	.15536	.18078	.44874
N106	-.38484	.77868	.09769	-.14078	-.41721
P71AN80	-.42408	.72571	.14197	-.28647	.27417
N63AN20	.63805	-.20271	.69390	.08625	-.19320
N109AN79	.69171	.05584	-.00227	.70208	.02619
SUO	-.34054	-.83969	-.84986	-.73116	.70605
KUNTA	-.62446	.84613	-.38413	-.89396	-2.27843
TCFOLD	-.28713	-.81810	-.04484	.92013	-.18933
TCFOHD	.38501	-.70940	2.53560	.12003	-.57197
TCFBLD	-.51183	-.51343	-.52974	-.72917	-.05872
TCFBHD	-.39872	-.12213	.52304	-1.42493	1.45390
ECFOLD	.21302	-.62145	-.63349	1.75348	.04296
ECFOHD	2.67821	.54427	-.53957	-.41683	.02048
ECFBLD	-.51052	-.09773	-.51248	.62621	-.03409
ECFBHD	-.60305	2.33151	.43545	.77621	.90915
Sample	PC1sco	PC2sco	PC3sco	PC4sco	PC5sco

3D LOADING
PLOT

*** MULTIPLE REGRESSION ***
 Dependent Variable.. CARDI
 Method: Stepwise Criteria PIN .1500 POUT .3000
 AC39 AC51 AN22 AN24 AN55 AN71 AN76 N103AC74 N104 N106
 N109AN79 N111 N16 N22 N38 N63AN20 N68 N73 N89 N93 P14 P15
 P16 P17 P23AN11 P51 P53 P54 P61 P64 P66 P67 P71AN80 P72 P73

Variable(s) Entered on Step Number

3.. N111

Multiple R .99993

R Square .99986

Adjusted R Square .99945

Standard Error 9.95592E-03

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	3	.72536	.24179
Residual	1	.00010	.00010
F = 2439.31526		Signif F = .0149 *	

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl	B	Beta
AN22	-.446633	.036146	-.905916 .012650		-.516844
N111	.232970	.043530	-.320131 .786070		.244634
P71AN80	-.732945	.017093	-.950126 -.515765		-.791820
Const.	.159622	.008579	.050619 .268625		

----- in -----

Variable	T	Sig T	
AN22	-12.356	.0514	hexadecane (-) O
N111	5.352	.1176	phtalate (+) -
P71AN80	-42.881	.0148	phtalate (-) *
(Constant)	18.607	.0342	

S C A T T E R P L O T

PCNro CARDI ADJPRED

PC1 .61932 .59990

PC2 -.51735 -.64279

PC3 .06581 .04163

PC4 .38029 .39511

PC5 .11487 .14485

DNDRO and 13 compounds
correlating with $|R| > 0.6$

Sample	DNDRO
SUO	1.00
KUNTA	5.00
TCFOLD	2.00
TCFOHD	3.00
TCFBLD	4.00
TCFBHD	2.00
ECFOLD	3.00
ECFOHD	3.00
ECFBLD	4.00
ECFBHD	6.00

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

Variable	PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
SEDDNDRO	1	9.68815	69.2	69.2
AN22	2	2.09383	15.0	84.2
AN42	3	1.30607	9.3	93.5
AN46	4	.38849	2.8	96.3
AN55	5	.29799	2.1	98.4
N106	6	.14844	1.1	99.4
N111	7	.07704	.6	100.0
N13	8	.00000	.0	100.0

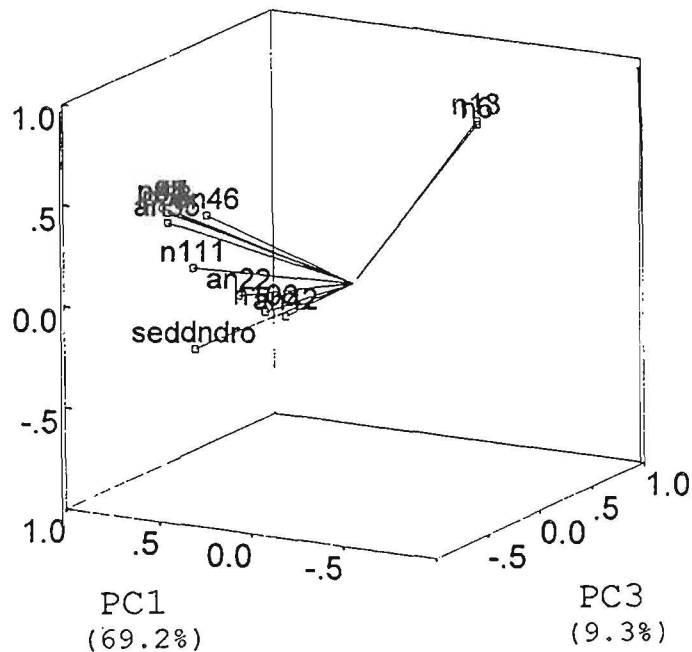
PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa	PC3loa	PC4loa	PC5loa
AN55	.97668	.19349	-.05280	.06636	.02139
N111	.94451	-.07066	.12733	.14929	-.00597
N84	.93961	.29829	-.16571	.02422	-.00323
N57	.93961	.29829	-.16571	.02422	-.00323
N92	.93961	.29829	-.16571	.02422	-.00323
P45	.93961	.29829	-.16571	.02422	-.00323
P53	.91198	.27867	-.16816	.02230	-.23806
AN22	.84441	-.25819	.39037	.20768	.10883
AN46	.84055	.21111	.08324	-.46017	.13260
SEDDNDRO	.83702	-.41451	-.05413	.01819	.27922
N106	.76600	-.35383	.50682	.12107	-.01535
AN42	.66620	-.36841	.52583	-.27001	-.23786
N13	-.39711	.73769	.48796	.12211	-.12414
N6	-.41296	.72780	.46393	-.03547	.24731
SUO	-.88211	2.10452	1.23168	1.09718	.36129
KUNTA	.49170	-1.81323	1.93142	.70840	.41643
TCFOLD	-.52153	-.09053	-.71829	-.20320	-.20420
TCFOHD	-.29347	.26896	.70138	-2.61668	.58198
TCFBLD	-.40097	-.46731	-.88628	.36949	.50979
TCFBHD	-.32656	-.15776	.16654	-.09793	-2.74513
ECFOLD	-.47953	-.32538	-.93745	.35679	.36564
ECFOHD	-.37249	-.24296	-.25573	.02660	.29616
ECFBLD	.14591	-.15420	-.95338	.36323	.53402
ECFBHD	2.63905	.87789	-.27989	-.00387	-.11598
Sample	PC1sco	PC2sco	PC3sco	PC4sco	PC5sco

3D LOADING
PLOT

PC1
(15.0%)



* * * MULTIPLE REGRESSION * * * *

Dependent Variable.. DNDRO

Variable(s) Entered on Step Number

2.. AN42
Multiple R .99298
R Square .98601
Adjusted R Square .97202
Standard Error .07778

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	2	.85289	.42645
Residual	2	.01210	.00605
F =	70.48395	Signif F = .0140 *	

Variables in the Equation					
Variable	B	SE B	95% Confdnce	Intrvl B	Beta
AN42	.293523	.085344	-.073686	.660732	.310122
N13	-.850006	.091847	-1.245198	-.454814	-.834483
Constant	.255130	.039125	.086786	.423474	

in					
Variable	T	Sig T			
AN42	3.439	.0751	hexadecanal	(+) O	
N13	-9.255	.0115	butyl cyclohexane	(-) *	
Constant	6.521	.0227			

Variables not in the Equation						
Variable	Beta In	Partial	Min Toler	T	Sig T	
AN22	-.247466	-.412696	.038906	-.453	.7292	
AN46	.149393	.958360	.575690	3.356	.1844	
AN55	.146673	.889645	.514663	1.948	.3019	
N106	-.408232	-.776562	.050621	-1.233	.4339	
N111	.170112	.659058	.209975	.876	.5419	
N57	.131502	.914817	.677009	2.265	.2647	
N6	.029124	.099762	.164142	.100	.9364	
N84	.131502	.914817	.677009	2.265	.2647	
N92	.131502	.914817	.677009	2.265	.2647	
P45	.131502	.914817	.677009	2.265	.2647	
P53	.114724	.829397	.731158	1.485	.3774	

S C A T T E R P L O T		
PCNro	DNDRO	ADJPRED
PC1	.83702	.64157
PC2	-.41451	-.59746
PC3	-.05413	.13925
PC4	.01819	.10112
PC5	.27922	.30293

HYDRO/sediment and 16 compounds $|R| > 0.6$

Sample	HYDRO
SUO	.00
KUNTA	19.00
TCFOLD	2.00
TCFOHD	.00
TCFBLD	.00
TCFBHD	3.00
ECFOLD	.00
ECFOHD	17.00
ECFBLD	5.00
ECFBHD	4.00

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

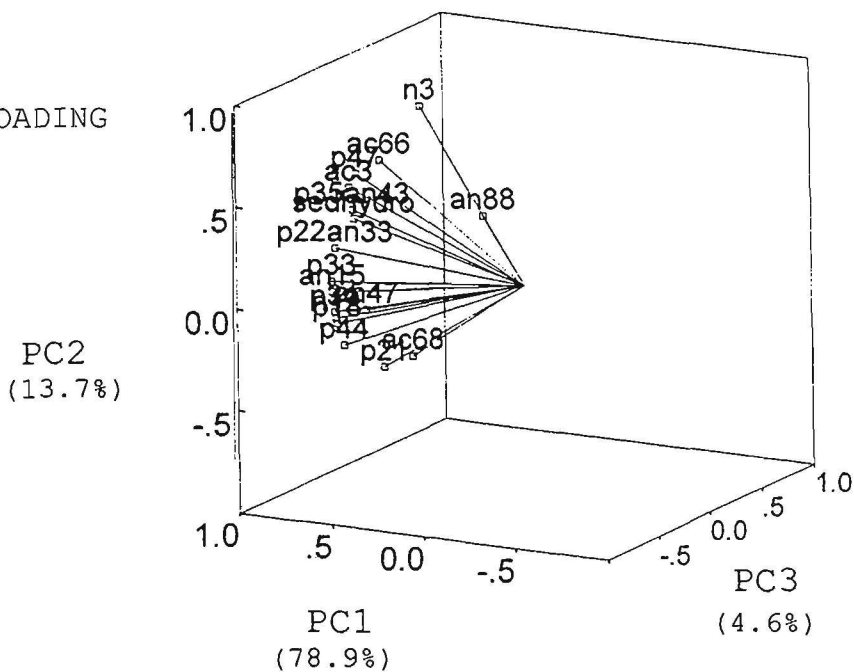
Variable	PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
SEDHYDRO	1	13.41846	78.9	78.9
AC3	2	2.32971	13.7	92.6
AC66	3	.77411	4.6	97.2
AC68	4	.31730	1.9	99.1
AN15	5	.11135	.7	99.7
AN47	6	.02681	.2	99.9
AN88	7	.02226	.1	100.0
N12	8	.00000	.0	100.0

PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa	PC3loa	PC4loa	PC5loa
P33	.99074	-.06872	-.11217	-.02235	-.00423
P22AN33	.98906	.08805	-.07948	-.06283	.02410
AN15	.98589	-.11901	-.11297	-.02115	-.00284
P31	.96866	-.21433	-.12105	-.00991	-.01296
N12	.96182	-.24239	-.12248	-.00744	-.01464
P18	.95512	-.26691	-.12365	-.00527	-.01611
P35AN43	.94857	.25606	.02421	-.15224	.05403
SEDHYDRO	.93114	.22051	.00382	.02256	-.28030
P44	.91954	-.36946	-.12775	.00406	-.02225
AC3	.91523	.39165	-.06843	-.05757	.02338
P47	.88288	.46029	-.05964	-.06223	.02750
AN47	.87442	-.22101	.01110	.43027	.03215
P21	.82953	-.51677	.09451	-.08631	.12567
AC66	.81828	.51079	.05321	.24192	.08462
AC68	.78808	-.50614	.30275	-.14993	.00136
N3	.56601	.81822	.00496	-.08385	.04490
AN88	.64636	.09349	.75417	.02669	-.02844
SUO	-.45472		-.13979	.71777	-.77408
KUNTA	1.61318		2.32678	.00591	-.23425
TCFOLD	-.63168		.03575	-.98039	-.24606
TCFOHD	-.43369		-.33338	1.06570	-1.04639
TCFBLD	-.63973		.08553	-.99511	.45002
TCFBHD	-.34693		.08877	1.00112	2.56411
ECFOLD	-.17442		-.33346	-1.22245	-.06919
ECFOHD	2.11639		-1.81960	-.12586	.10821
ECFBLD	-.61094		.12469	-.90445	-.13769
ECFBHD	-.43745		-.03528	1.43776	-.61467
Sample	PC1sco	PC2sco	PC3sco	PC4sco	PC5sco

3D LOADING
PLOT



* * * M U L T I P L E R E G R E S S I O N * * * *

Dependent Variable.. HYDRO

Method: Stepwise Criteria PIN .1500 POUT .3000

AC3 AC66 AC68 AN15 AN47 AN88 N12 N3 P18 P21
P22AN33 P31 P33 P35AN43 P44 P47

Variable(s) Entered on Step Number

3.. N3

Multiple R .99981

R Square .99961

Adjusted R Square .99845

Standard Error .01800

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	3	.83323	.27774
Residual	1	.00032	.00032
F =	857.57886	Signif F =	.0251 *

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce	Intrvl B	Beta
AC66	1.450536	.047251	.850157	2.050915	1.023486
AN88	.389133	.025383	.066607	.711659	.316505
N3	-.236467	.037263	-.709940	.237006	-.206276
Const.	-.368476	.013575	-.540963	-.195989	

----- in -----

Variable	T	Sig T		
AC66	30.699	.0207	oleic acid	(+) *
AN88	15.330	.0415	heptacosane	(+) *
N3	-6.346	.0995	1,3-bis-methylene cyclopentane	(-) O
Const.	-27.144	.0234		

S C A T T E R P L O T

PCNro HYDRO ADJPRED

PC1 .93114 .99583

PC2 .22051 .15785

PC3 .00382 -.11130

PC4 .02256 -.01013

PC5 -.28030 -.25516

LIITE 6.

Rakkolevän eliöyhteisön biomassan ja yhdisteiden
pitoisuuksien monimuuttuja-analyysi

Six bladder wrack effects
and 22 substance groups

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

Variable	PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
MYTILUS	1	11.98311	44.4	44.4
LYMNEA	2	5.19960	19.3	63.6
THEODOXU	3	4.21252	15.6	79.2
GAMMARUS	4	2.72480	10.1	89.3
RAKYHTG	5	1.47753	5.5	94.8
RAKKOLML	6	1.02758	3.8	98.6
ALA	7	.27369	1.0	99.6
ALC	8	.07164	.3	99.9
ALD	9	.02952	.1	100.0
AMD	10	.00000	.0	100.0

PC extracted 10 factors.

PC loading Matrix:

	PC1	PC2	PC3	PC4	PC5
ALC	.98252	-.15806	.05938	-.07215	-.02538
ALD	.96466	-.15854	-.15771	.07803	-.11232
PAD	.96121	-.27430	-.01349	.00441	-.02071
RA	.96114	-.25596	-.07418	.02444	-.03898
TER	.95929	-.27192	-.01709	-.01765	.03241
P	.95790	-.28469	.01255	.00632	-.02843
STI	.95743	-.28607	.00743	.00842	-.02299
NIT	.95052	-.29225	-.01992	.01110	.01127
PHD	.94777	-.27040	-.04316	.02626	-.02239
E	.84705	.37843	.12900	.21216	-.19668
EST	.81182	.41173	.20893	-.32042	.11813
PHO	.79426	-.35884	-.24680	-.03205	.41533
K	.70410	.54476	.02062	-.39753	-.14515
S	.63189	.46266	.50830	-.31687	.10896
ETB	.16977	.90264	.36888	.00536	-.07510
THEODOXU	-.09941	-.74048	.33031	.51692	-.03190
UHC	.46149	.72894	-.22989	.22069	.37555
MYTILUS	-.18062	-.66477	.10518	.26866	.47854
RAKYHTG	-.06273	.06944	.92161	.08201	.19782
LYMNEA	.05749	.49271	.80345	-.19599	.14377
AMD	-.11008	.10015	-.77082	.05887	.35572
RAKKOLML	.00188	-.61809	.71476	-.21263	-.16104
ALA	.12314	.42011	-.68653	.28194	-.47061
GAMMARUS	-.23797	-.31834	.58251	.43386	-.37274
ARA	.12930	.43549	.19499	.86557	.04098
AMN	.60170	.29158	.00582	.66475	-.24488
PHT	.16304	.36410	.19482	.60311	.43613

	PC6	PC7	PC8	PC9
ALC	.01144	-.01120	-.00655	.00059
ALD	.00336	.00739	.02385	-.00954
PAD	.00702	-.00956	.00492	-.00581
RA	.05402	-.00570	.00910	-.00567
TER	.06243	-.01656	.00120	-.00115
P	.01609	-.00877	.00036	-.00638
STI	-.02586	-.00947	.00484	-.00729
NIT	-.09986	-.01359	.01567	-.00784
PHD	-.15752	-.00865	.02349	-.01069
E	.19020	.03507	-.03932	-.00175
EST	-.09449	-.02973	-.02083	.02997
PHO	-.00373	-.06166	.04460	.01204
K	.16273	.00152	-.02020	.03272
S	.08772	-.02624	-.08068	.03366
ETB	.09444	.02396	-.06847	.02221
THEODOXU	.01623	.21855	.01235	.12765
UHC	-.10170	-.02152	.04084	.02450
MYTILUS	.44337	-.01791	-.11996	-.04400
RAKYHTG	.29497	.00811	.09449	-.00416
LYMNEA	.17281	.05444	.12428	-.03242
AMD	.49697	-.03128	.06982	.02930
RAKKOLML	-.04321	.17817	.02202	-.04275
ALA	.15451	.07856	.07606	-.01512
GAMMARUS	.07355	-.41029	.03032	.02955
ARA	-.02726	.04712	-.03107	-.02806
AMN	.21318	.06496	-.02553	-.02686
PHT	-.49828	-.01585	.01617	-.01244

Sample scores matrix

Sample	PC1	PC2	PC3	PC4	PC5
SUO	.11480	1.76961	.99432	-1.96825	.15170
KUNTA	-.18478	.84116	1.56694	2.07937	.61511
TCFOLD	-.60111	-.54776	-.20445	-.11126	-.95126
TCFOHD	.05695	1.36148	-1.67423	.70100	-1.46475
TCFBLD	-.67158	-.94346	.13688	-.42591	.12908
TCFBHD	-.40594	-.19601	-1.32355	-.15055	2.06537
ECFOLD	-.07189	-.92439	.72944	-.25618	-.63178
ECFOHD	2.72510	-.65373	-.05553	.04951	.08394
ECFBLD	-.67911	-.87642	.35728	-.06587	-.65431
ECFBHD	-.28246	.16951	-.52711	.14815	.65690

Sample	PC6	PC7	PC8	PC9
SUO	.12323	-.09057	-.15817	.14548
KUNTA	.35599	.05214	-.26323	-.04628
TCFOLD	.15090	-1.02659	-2.02759	-1.13658
TCFOHD	.47274	.46269	.57788	.17799
TCFBLD	.39711	2.50332	-.31594	-.13396
TCFBHD	1.11538	-.74965	.16999	.14715
ECFOLD	.42123	-.65727	2.01720	-1.25098
ECFOHD	-.04561	.10042	-.40897	.23339
ECFBLD	-.36463	-.66721	.12699	2.39089
ECFBHD	-2.62633	.07273	.28184	-.52711

* * * M U L T I P L E R E G R E S S I O N * * * *

Dependent Variable.. MYTILUS

Method: Stepwise Criteria PIN .1500 POUT .3000
 ALA ALC ALD AMD AMN ARA E EST ETB K NIT P PAD PHD
 PHO PHT RA S STI TER UHC

Variable(s) Entered on Step Number

1.. ETB

Multiple R .71104

R Square .50558

Adjusted R Square .43495

Standard Error .26463

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	1	.50129	.50129
Residual	7	.49022	.07003
F =	7.15812	Signif F = .0317 *	

----- Variables in the Equation-----

Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl B	Beta
ETB	-.807722	.301900	-1.521600 -.093845	-.711044
Const.	.159347	.100632	-.078610 .397304	

----- in -----

Variable	T	Sig T	
ETB	-2.675	.0317	ethyl benzene (-) *
Constant	1.583	.1573	

Dependent Variable.. LYMNEA

Variable(s) Entered on Step Number

3.. AMD

Multiple R .95919

R Square .92005

Adjusted R Square .87209

Standard Error .10642

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	3	.65165	.21722
Residual	5	.05662	.01132
F =	19.18068	Signif F = .0036 **	

----- Variables in the Equation-----

Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl B	Beta
ALD	-.570826	.118212	-.874694 -.266958	-.662660
AMD	-.211790	.119829	-.519817 .096236	-.251043
S	.767828	.145424	.394009 1.141647	.805455
Const.	.105031	.041888	-.002643 .212705	

----- in -----

Variable	T	Sig T	
ALD	-4.829	.0048	aldehydes (-) **
AMD	-1.767	.1374	amides (-) -
S	5.280	.0032	sulfur compounds (+) **
Const.	2.507	.0540	

Dependent Variable.. THEOD

Variable(s) Entered on Step Number

4.. PHT

Multiple R .99069

R Square .98146

Adjusted R Square .96292

Standard Error .06761

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	4	.96796	.24199
Residual	4	.01829	.00457
F =	52.93716	Signif F = .0010 ***	

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl	B	Beta
ALC	1.420633	.164494	.963931 1.877335	1.381174	
K	-1.498755	.103776	-1.786878 -1.210632	-1.439039	
PHO	-.682101	.133122	-1.051700 -.312502	-.674551	
PHT	-.207862	.076770	-.421007 .005283	-.190239	
Const.	.137776	.026638	.063819 .211732		

----- in -----

Variable	T	Sig T	
ALC	8.636	.0010	alcohols (+) ***
K	-14.442	.0001	ketones (-) ***
PHO	-5.124	.0069	phosphates (-) **
PHT	-2.708	.0537	phtalates (-) O
Const.	5.172	.0066	

Dependent Variable.. GAMMA

Variable(s) Entered on Step Number

2..	ARA
Multiple R	.84109
R Square	.70743
Adjusted R Square	.60991
Standard Error	.22032

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	2	.70424	.35212
Residual	6	.29125	.04854
F =	7.25399	Signif F = .0250 *	

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl	B	Beta
ARA	.800009	.281905	.110215 1.489802	.673782	
UHC	-.931461	.273513	-1.600721 -.262202	-.808564	
Const.	-.010445	.091416	-.234131 .213241		

----- in -----

Variable	T	Sig T	
ARA	2.838	.0296	aromatic acids (+) *
UHC	-3.406	.0144	unsaturated hydrocarbons (-) *
Constant	-.114	.9128	

Dependent Variable.. RAKYHTG

Variable(s) Entered on Step Number

3..	E
Multiple R	.93386
R Square	.87210
Adjusted R Square	.79536
Standard Error	.13524

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	3	.62353	.20784
Residual	5	.09145	.01829
F =	11.36425	Signif F = .0114 *	

```

----- Variables in the Equation -----
Variable          B          SE B      95% Confdnce Intrvl B      Beta
ALA      -.828276   .156354   -1.230192   -.426361   -.979204
E        .438507   .196420   -.066399   .943414   .443431
PHO      -.550780   .155507   -.950517   -.151043   -.639723
Const.   .133110   .054722   -.007555   .273775
----- in -----
Variable          T      Sig T
ALA      -5.297   .0032   aliphatic carboxylic acids (-) **
E         2.232   .0759   ethers (+) O
PHO      -3.542   .0165   phosphates (-) *
Constant   2.432   .0592

```

Dependent Variable.. RAKKOML

Variable(s) Entered on Step Number

```

3.. PHO
Multiple R          .97617
R Square            .95291
Adjusted R Square   .92465
Standard Error      .09691
Analysis of Variance
                DF      Sum of Squares      Mean Square
Regression        3          .95014          .31671
Residual          5          .04696          .00939
F = 33.72287      Signif F = .0010 ***

```

```

----- Variables in the Equation -----
Variable          B          SE B      95% Confdnce Intrvl B      Beta
AMD      -.550379   .103120   -.815454   -.285303   -.549837
PHO       .288337   .103168   .023138   .553536   .283588
UHC      -.814667   .120291   -1.123881   -.505453   -.706606
Constant   .111831   .037532   .015353   .208308
----- in -----
Variable          T      Sig T
AMD      -5.337   .0031   amides (-) **
PHO       2.795   .0382   phosphates (+) *
UHC      -6.772   .0011   unsaturated hydrocarbons (-) **
Constant   2.980   .0308

```

SATTERPLOT DATA

Nro	MYTILUS	ADJPRED	LYMNEA	ADJPRED	THEOD	ADJPRED
PC1	-.18062	.04760	.05749	1.17179	-.09941	.13251
PC2	-.66477	-.11202	.49271	.56369	-.74048	-.48325
PC3	.10518	-.18771	.80345	.44399	.33031	.30802
PC4	.26866	.13615	-.19599	-.19454	.51692	.54568
PC5	.47800	.16203	.14300	.19015	-.03100	-.14126
PC6	.44337	.03543	.17281	.00161	.01623	.01629
PC7	-.01791	.16471	.05444	.09454	.21855	.15372
PC8	-.11996	.28775	.12428	-.01164	.01235	.14662
PC9	-.04401	.17059	-.03243	.15543	.12766	.07598

Nro	GAMMAR	ADJPRED	RAKYHTG	ADJPRED	RAKKOML	ADJPRED
PC1	-.23797	-.37293	-.06273	1.08364	.00188	.12625
PC2	-.31834	-.36742	.06944	.23552	-.61809	-.88961
PC3	.58251	.23423	.92161	.24405	.71476	.39462
PC4	.43386	.70053	.08201	-.00781	-.21263	-.09423
PC5	-.37200	-.31340	.19700	.22691	-.16100	-.31979
PC6	.07355	.05921	.29497	.05729	-.04321	-.12917
PC7	-.41029	.13803	.00811	.13903	.17817	.11911
PC8	.03032	-.09576	.09449	.00782	.02202	.05810
PC9	.02956	-.07432	-.00417	.16590	-.04275	.09939

MYTILUS / bladder wrack
and 10 compounds $|R| > 0.6$

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

Variable	PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
MYTILUS	1	6.35004	57.7	57.7
AN63	2	3.93592	35.8	93.5
AN70	3	.41641	3.8	97.3
AN73	4	.13787	1.3	98.5
N6	5	.10803	1.0	99.5
P26	6	.05172	.5	100.0
P4	7	.00000	.0	100.0
P43	8	.00000	.0	100.0

PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa	PC3loa	PC4loa	PC5loa
MYTILUS	-.95419	-.15644	.10413	.03030	.14524
P70	.94981	-.28513	-.11776	.00740	-.01279
P43	.93174	.25473	-.03529	.16401	.19315
N6	.85049	-.46278	.18974	-.15472	-.03256
P4	.79423	-.59092	-.08376	.03592	.10758
N107P68A	.77924	-.59966	-.11104	-.13652	-.00226
P56	.76260	-.59043	.17350	.17167	-.09346
P26	.51176	.82735	-.12531	.11745	-.13046
AN73	.53779	.82650	.15716	-.00553	-.03940
AN70	.49453	.79873	-.30966	-.12787	.06287
AN63	.57505	.69867	.41076	-.08054	.07462
SUO	1.89986		-1.99632	.18182	.63341
KUNTA	-.47083		-.01353	.36215	.94550
TCFOLD	-.42709		.15690	.58674	-.02155
TCFOHD	1.42703		1.70005	1.50826	-.77843
TCFBLD	-.90292		-.23274	.37661	.18298
TCFBHD	-.99269		-.25892	.52518	.30364
ECFOLD	-.66414		-.26583	-.03982	-.39566
ECFOHD	.01843		-.47269	-1.25279	-2.32227
ECFBLD	-.53610		.08822	-.20189	.29691
ECFBHD	.64844		1.29486	-2.0462	1.15546
Sample	PC1sco		PC2sco	PC3sco	PC4sco
				PC5sco	

* * * M U L T I P L E R E G R E S S I O N * * * *

Dependent Variable.. MYTILUS

Method: Stepwise Criteria PIN .0500 POUT .1000
AN63 AN70 AN73 N107P68A N6 P26 P4 P43 P56 P70

Variable(s) Entered on Step Number

1.. P43

Multiple R .96632

R Square .93377

Adjusted R Square .91170

Standard Error .13534

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	1	.77476	.77476
Residual	3	.05495	.01832
F =	42.29947	Signif F =	.0074 **


```

----- Variables in the Equation -----
Variable      B      SE B      95% Confdnce Intrvl B      Beta
P43      -1.193988      .183583      -1.778222      -.609753      -.966320
Constant      .193996      .082038      -.067083      .455075

```

```

----- in -----
Variable      T      Sig T
P43      -6.504      .0074      branched eicosane (-) **
Constant      2.365      .0990

```

```

----- Variables not in the Equation -----
Variable      Beta In      Partial      Min Toler      T      Sig T
AN63      -.189982      -.677019      .841017      -1.301      .3230
AN70      -.011664      -.036936      .664132      -.052      .9631
AN73      -.158083      -.546706      .792075      -.923      .4533
N107P68A      .027743      .067189      .388445      .095      .9328
N6      -.102402      -.278260      .489009      -.410      .7217
P26      -.108038      -.357741      .726130      -.542      .6423
P4      .074566      .195731      .456312      .282      .8043
P56      -.060290      -.186862      .636174      -.269      .8131
P70      -.049160      -.078102      .167158      -.111      .9219

```

```

S C A T T E R P L O T
PCNro MYTILUS ADJPRED
PC1      -.95419      -.44062
PC2      -.15644      -.09828
PC3      .10413      .32745
PC4      .03030      -.01169
PC5      .14524      -.08842

```

LYMNEA /bladder wrack
and 17 compounds $|R| > 0.6$

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

Variable	PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
LYMNEA	1	14.53483	80.7	80.7
AC8	2	1.68777	9.4	90.1
N107P68A	3	1.22640	6.8	96.9
N2	4	.42585	2.4	99.3
N24	5	.06143	.3	99.6
N4	6	.04208	.2	99.9
N7	7	.02164	.1	100.0
N9	8	.00000	.0	100.0

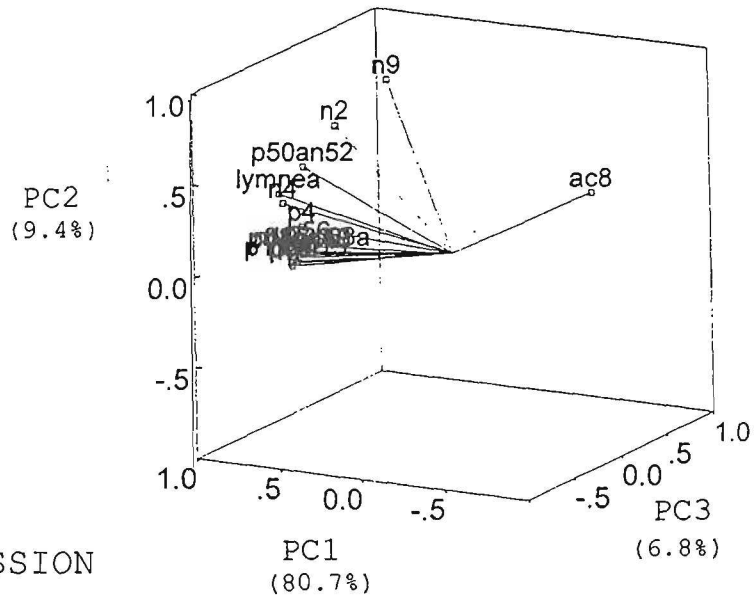
PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa	PC3loa	PC4loa	PC5loa
P65	.99210	-.10080	-.01720	.06807	.00001
P69	.98508	-.17001	.00241	-.02281	-.00331
P55	.98323	-.16588	.00688	.07439	-.00421
P62AN59	.98147	-.13445	.10234	.08468	.00276
N24	.97966	-.16374	.01217	.11348	-.00481
P4	.97719	.00297	.11411	-.15750	-.01358
P36	.97588	-.15200	.07146	.13574	-.01640
P41AN48	.97563	-.14035	.08635	.14158	-.02561
P11AN15	.96426	-.16587	.02968	.14908	.07592
P56	.96363	-.11316	.16835	.15559	-.04899
N7	.95683	-.17284	-.03280	-.21987	.00041
N107P68A	.93723	-.13773	.15242	-.27084	-.02532
N4	.91880	.21235	-.19080	-.25772	.02391
P50AN52	.89379	.37130	-.00871	-.24031	.01780
N2	.79999	.56757	.17626	.03919	-.06411
LYMNEA	.79636	.33922	-.44720	.11309	.17031
N9	.40310	.89704	.04785	.15650	-.05976
AC8	-.31511	.13965	.93085	-.02678	.11780

Sample	PC1sco	PC2sco	PC3sco	PC4sco	PC5sco
SUO	2.78312	-.46350	.04031	.36481	-.01431
KUNTA	.06293	2.56728	-.98881	.32546	.14859
TCFOLD	-.46190	-.41821	-.10716	.42563	-2.08394
TCFOHD	-.22881	.84195	2.31658	.30891	-.23747
TCFBLD	-.47907	-.57269	-.72168	.64619	.14127
TCFBHD	-.49977	-.60938	.47585	.51466	1.52242
ECFOLD	-.34595	-.36572	-1.01437	.11506	1.05505
ECFOHD	.04215	-.02836	-.16425	-2.74065	-.16895
ECFBLD	-.47529	-.58525	-.56090	.39197	-.90013
ECFBHD	-.39741	-.36613	.72443	-.35205	.53748

3D LOADING PLOT



PC-REGRESSION

Dependent Variable.. **LYMNEA**
 Method: Stepwise Criteria PIN .1500 POUT .3000
 AC8 N107P68A N2 N24 N4 N7 N9 P11AN15 P36
 P4 P41AN48 P50AN52 P55 P56 P62AN59 P65 P69

Variable(s) Entered on Step Number	S C A T T E R P L O T	
3.. P56	Sample	LYMNEA ADJPRED
Multiple R	PC1	.79636 .75097
R Square	PC2	.33922 .34529
Adjusted R Square	PC3	-.44720 -.35147
Standard Error	PC4	.11309 .11977
	PC5	.17031 .16701

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	3	.80216	.26739
Residual	1	.00001	.00001
F =	37874.31755	Signif F =	.0038 **

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl B	Beta
AC8	-.707499	.003349	-.750053 -.664945	-.731104
P50AN52	.508681	.004485	.451694 .565669	.501952
P56	-.122309	.004489	-.179352 -.065265	-.117713
Constant	.236471	.001702	.214849 .258092	

----- in -----

Variable	T	Sig T	
AC8	-211.252	.0030	pentanoic acid (-) **
P50AN52	113.418	.0056	eicosane (+) **
P56	-27.244	.0234	(acetyl-dihydroxy-dimethyl-benzofuranoyl)-pentanedione (-) *
(Constant)	138.965	.0046	

THEODOXUS and 17 compounds
correlating with $|R| > 0.6$

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

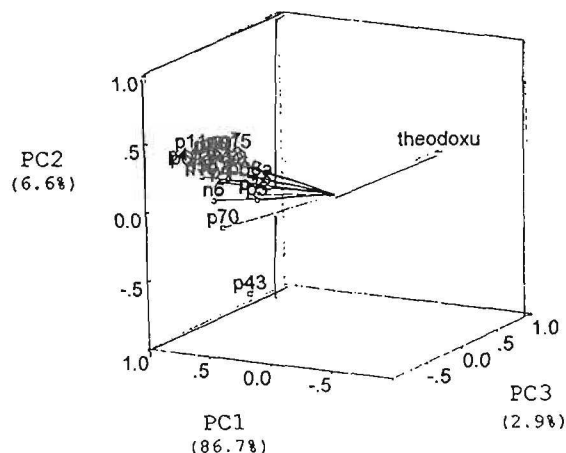
Variable	PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
THEODOXU	1	15.60274	86.7	86.7
N107P68A	2	1.18113	6.6	93.2
N24	3	.51848	2.9	96.1
N6	4	.32729	1.8	97.9
N7	5	.22774	1.3	99.2
P11AN15	6	.12798	.7	99.9
P12	7	.01464	.1	100.0
P36	8	.00000	.0	100.0

PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa	PC3loa	PC4loa	PC5loa
P62AN59	.99007	.10024	-.08008	-.02007	.05179
P69	.98229	.18038	.02711	.03147	.00388
P4	.98138	-.03511	.07828	.16043	.00878
P36	.97918	.14437	-.12483	-.02460	.06438
P41AN48	.97885	.14037	-.14317	-.02159	.03135
P55	.97814	.19559	-.05056	-.00279	.04810
P56	.97669	.07323	-.19723	-.02054	-.01856
P65	.97541	.19574	-.04493	.03599	.05729
N24	.97436	.19719	-.08274	-.01697	.06735
N107P68A	.96599	-.03187	.16333	.11822	-.12263
P11AN15	.96058	.21852	-.05555	-.11816	.05462
N7	.95358	.17321	.19115	.10267	-.09743
N6	.93827	-.12160	-.10194	.08375	-.28663
P70	.92561	-.34383	-.00427	.09636	.02047
P5	.85999	-.21936	.38339	.00251	-.06095
P12	.85895	-.17472	.36058	-.18290	.21687
THEODOXU	-.79844	.38399	.10620	.42069	.15609
P43	.59068	-.73354	-.23195	.17848	.15544
SUO	2.76781	.56268	-.26994	-.06351	.21227
KUNTA	-.40924	.10483	-.22307	1.32036	.66359
TCFOLD	-.44791	.31246	-.93009	-.50428	-.62880
TCFOHD	.04371	-1.93858	-1.32843	.12981	-1.26990
TCFBLD	-.58177	1.10160	-.30867	.33651	.28515
TCFBHD	-.35939	.31577	.71309	-2.35333	-.26572
ECFOLD	-.45665	.73963	-.14736	.06602	-.41174
ECFOHD	.08026	-.31245	2.26408	.96602	-1.25919
ECFBLD	-.52315	.66751	-.36930	.49124	.62181
ECFBHD	-.11368	-1.55345	.59969	-.38883	2.05254
Sample	PC1sco	PC2sco	PC3sco	PC4sco	PC5sco

3D LOADING
PLOT



* * * M U L T I P L E R E G R E S S I O N * * * *

Dependent Variable.. THEOD

Method: Stepwise Criteria PIN .1500 POUT .3000
 N107P68A N24 N6 N7 P11AN15 P12 P36 P4 P41AN48 P43
 P5 P55 P56 P62AN59 P65 P69 P70

Variable(s) Entered on Step Number

3.. N107P68A

Multiple R 1.00000

R Square .99999

Adjusted R Square .99997

Standard Error 2.49210E-03

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	3	.98315	.32772
Residual	1	.00001	.00001

F = 52767.68914 Signif F = .0032 **

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl B	Beta
N107P68A	-.076496	.008163	-.180222 .027231	-.066852
P12	-.704838	.004995	-.768309 -.641367	-.614000
P56	-.419732	.006346	-.500361 -.339103	-.394060
Constant	.290800	.001329	.273916 .307683	

----- in -----

Variable	T	Sig T		
N107P68A	-9.371	.0677	tricosane	(-) O
P12	-141.100	.0045	4-tridecanone	(-) **
P56	-66.145	.0096	(acetyl-dihydroxy-dimethyl- benzofuranyl)-pentanedione	(-) **
Constant	218.853	.0029		

S C A T T E R P L O T
 PCNro THEOD ADJPRED
 PC1 -.79844 -1.06573
 PC2 .38399 .38773
 PC3 .10620 .11461
 PC4 .42069 .41625
 PC5 .15609 .14974

GAMMARUS PCA

Correlation Coefficients

Compound	GAMMARUS	Compound	GAMMARUS
AC6	-.5603	N64AC11	-.6540*
AN45	-.5672	P12	-.6141
AN56	-.5483	P15	-.5955
N39P6	-.5073	P5	-.5464

GAMMARUS and eight compounds $|R| > 0.5$

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

Variable	PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
GAMMARUS	1	5.14314	57.1	57.1
AC6	2	2.06548	22.9	80.1
AN45	3	.70683	7.9	87.9
AN56	4	.54773	6.1	94.0
N39P6	5	.35721	4.0	98.0
N64AC11	6	.09407	1.0	99.0
P12	7	.08555	1.0	100.0
P15	8	.00000	.0	100.0
P5	9	.00000	.0	100.0

PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa	PC3loa	PC4loa	PC5loa
AN56	.88732	-.22753	.15155	.34035	.06986
GAMMARUS	-.82420	-.04877	.17314	.43162	.27769
P15	.80927	-.11051	.53530	.03106	-.18383
N64AC11	.78942	.38351	-.19456	-.13803	.39295
P5	.78146	-.55007	.13105	-.00858	.21680
AN45	.72558	-.14103	-.53989	.36089	-.16834
AC6	.70316	.68178	.05250	.14768	-.10056
P12	.66771	-.66660	-.10234	-.25592	.01108
N39P6	.56656	.78765	.08712	-.08919	.03794
SUO	1.01043		-1.85264	.11615	-1.26822
KUNTA	-.65054		-.34998	1.85265	1.04074
TCFOLD	-1.02744		.39341	.36166	-.41327
TCFOHD	.53152		1.29049	.82670	-.80066
TCFBLD	-.59270		.46968	-.40838	-1.32004
TCFBHD	1.52132		1.49739	-1.21389	.48720
ECFOLD	-.95752		.04050	.63042	.20014
ECFOHD	1.12892		-.43757	1.79176	1.04792
ECFBLD	-1.15134		-.06921	-.05247	.05041
ECFBHD	.18736		-.98206	-1.66477	.16388
Sample	PC1sco	PC2sco	PC3sco	PC4sco	PC5sco

P C R E G R E S S I O N * * * *

Dependent Variable.. GAMMARUS

Method: Stepwise Criteria PIN .1500 POUT .3000
AC6 AN45 AN56 N39P6 N64AC11 P12 P15 P5

Variable(s) Entered on Step Number

3.. AC6

Multiple R .99947

R Square .99895

Adjusted R Square .99579

Standard Error .03205

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	3	.97402	.32467
Residual	1	.00103	.00103
F =	316.03883	Signif F =	.0413 *

----- Variables in the Equation-----

Variable	B	SE B	95% Confdnce	Intrvl B	Beta
AC6	-.359704	.057339	-1.088261	.368854	-.270928
N64AC11	-.640048	.049699	-1.271528	-.008568	-.533476
P15	-.573394	.039335	-1.073193	-.073595	-.504426
Constant	.390570	.019700	.140255	.640886	

----- in -----

Variable	T	Sig T		
AC6	-6.273	.1006	2-methylpropanoic acid	(-) -
N64AC11	-12.879	.0493	2,6-bis(dimethylethyl)-2,5-cyclopentadiene-1,4-dione	(-) *
P15	-14.577	.0436	pentadecene I	(-) *
(Constant)	19.826	.0321		

S C A T T E R P L O T
PCNro GAMMARUS ADJPRED
PC1 -.82420 -.96198
PC2 -.04877 .03682
PC3 .17314 .23681
PC4 .43162 .38815
PC5 .27769 .62564

M U L T I P L E R E G R E S S I O N with original data

Dependent Variable.. GAMMARUS

Method: Stepwise Criteria PIN .1500 POUT .3000
 AC6 AN45 AN56 N39P6 N64AC11 P12 P15 P5

Variable(s) Entered on Step Number

2.. P12

Multiple R .77744

R Square .60441

Adjusted R Square .49138

Standard Error 4.15101

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	2	184.28406	92.14203
Residual	7	120.61594	17.23085
F =	5.34750	Signif F = .0389 *	

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl B	Beta
N64AC11	-.312159	.155646	-.680202 .055885	-.505627
P12	-.445027	.251719	-1.040246 .150192	-.445721
Const.	10.911842	1.975652	6.240177 15.583507	

----- in -----

Variable	T	Sig T	
N64AC11	-2.006	.0849	2,6-bis(dimethylethyl)-2,5-cyclohexadiene-1,4-dione (-) O
P12	-1.768	.1204	
Const.	5.523	.0009	

S C A T T E R P L O T

Sample	GAMMARUS	ADJPRED
SUO	1.00	-7.85862
KUNTA	14.00	9.06681
TCFOLD	11.00	9.58329
TCFOHD	2.00	6.28831
TCFBLD	2.00	9.65672
TCFBHD	.00	-5.91859
ECFOLD	13.00	9.07895
ECFOHD	3.00	5.49888
ECFBLD	13.00	9.15231
ECFBHD	2.00	7.56650

RAKYHTG and 16 compounds $|R| > 0.6$

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

Variable	PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
AKYHTG	1	11.17917	65.8	65.8
AC10	2	2.11471	12.4	78.2
AC36	3	1.32065	7.8	86.0
AC5	4	1.08857	6.4	92.4
AC8	5	.87514	5.1	97.5
AN70	6	.28702	1.7	99.2
AN73	7	.12455	.7	99.9
AN81	8	.01020	.1	100.0
AN82	9	.00000	.0	100.0
AN84	10	.00000	.0	100.0

PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa	PC3loa	PC4loa	PC5loa
AC10	.97029	.14422	.07391	-.05706	.11426
AC8	.94913	.15607	.04827	-.09341	-.18961
AN73	.94837	-.02429	.16205	-.02301	.23968
P38AC46	.92368	.25895	.20203	.15893	-.06062
P58	.90065	.31522	.10229	.06368	.19234
P26	.88719	-.27351	.06679	-.08824	.24428
AN82	.87778	-.42855	-.04500	.14463	-.11405
AN70	.87694	-.45380	.12775	.04961	.03102
AC5	.84219	.30021	-.10073	.07394	-.39582
AN81	.82931	.54813	.04492	-.01575	.00465
AN84	.82704	-.49591	.01684	.15712	-.18647
RAKYHTG	-.81900	.07802	.47680	.25712	.08239
AC36	.74725	.58647	.03526	-.10538	-.23675
AN86	.74649	-.62156	.07174	.15893	-.15158
P8	.70353	-.00445	-.08140	-.32742	.54716
N3	-.26630	.01905	.95123	.03635	-.01924
N6	.11487	.25471	-.23424	.87987	.27807
SUO	-.77102	.54395	-.65316	2.12694	1.09842
KUNTA	-.76271	.06818	2.70526	.10709	-.05737
TCFOLD	-.00463	.25769	-.52316	-1.02336	1.28037
TCFOHD	2.42784	1.08823	.39716	.45134	.23497
TCFBLD	-.67518	.32968	-.39116	-.60002	-.19967
TCFBHD	-.14169	1.32978	-.48436	-.87009	-1.58490
ECFOLD	-.67110	-.12816	-.20050	-.07430	-.16525
ECFOHD	.07834	-1.05990	-.51478	1.11493	-1.66931
ECFBLD	-.39629	-.35423	-.36061	-.82654	.81879
ECFBHD	.91644	-2.07522	.02531	-.40600	.24395
Sample	PC1sco	PC2sco	PC3sco	PC4sco	PC5sco

PC REGRESSION

Dependent Variable.. **RAKYHTG**

Method: Stepwise Criteria PIN .1500 POUT .3000
AC10 AC36 AC5 AC8 AN70 AN73 AN81 AN82 AN84
AN86 N3 N6 P26 P38AC46 P58 P8

Variable(s) Removed on Step Number

4.. P58
Multiple R .99992
R Square .99984
Adjusted R Square .99968
Standard Error 8.88619E-03
Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	2	.97579	.48790
Residual	2	.00016	.00008

F = 6178.68115 Signif F = .0002

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce Intrvl B	Beta
AC10	-.944707	.012350	-.997847	-.784917
N3	.367581	.010845	.320920	.347815
Constant	.197403	.005687	.172936	.221871

----- in -----

Variable	T	Sig T
AC10	-76.492	.0002
N3	33.895	.0009
(Constant)	34.714	.0008

Variable(s) Entered on Step Number

5.. AN86
Multiple R 1.00000
R Square 1.00000
Adjusted R Square 1.00000
Standard Error 6.13881E-04
Analysis of Variance

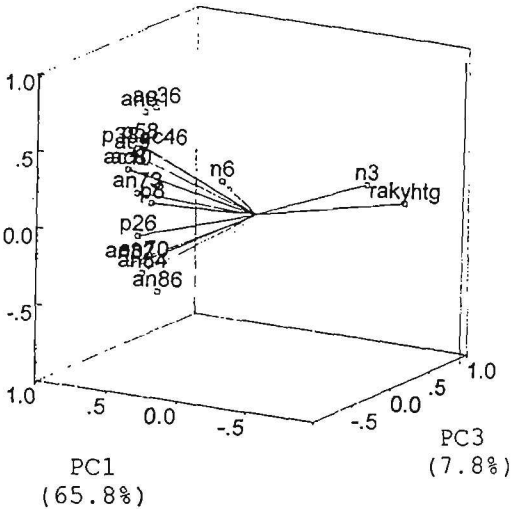
	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	3	.97595	.32532
Residual	1	.00000	.00000
F = 863251.67083 Signif F = .0008 ***			

----- Variables in the Equation -----					
Variable	B	SE B	95% Confdnce	Intrvl B	Beta
AC10	-.927552	.001197	-.942756	-.912347	-.770663
AN86	-.017984	8.7956E-04	-.029160	-.006808	-.018101
N3	.371473	7.7298E-04	.361652	.381295	.351498
Constant	.193302	4.4109E-04	.187698	.198907	

----- in -----					
Variable	T	Sig T			
AC10	-775.141	.0008	hexanoic acid	(-) ***	
AN86	-20.447	.0311	hexacosane derivative	(-) *	
N3	480.575	.0013	1,3-bis-methylene cyclopentane	(+) **	
Constant	438.238	.0015			

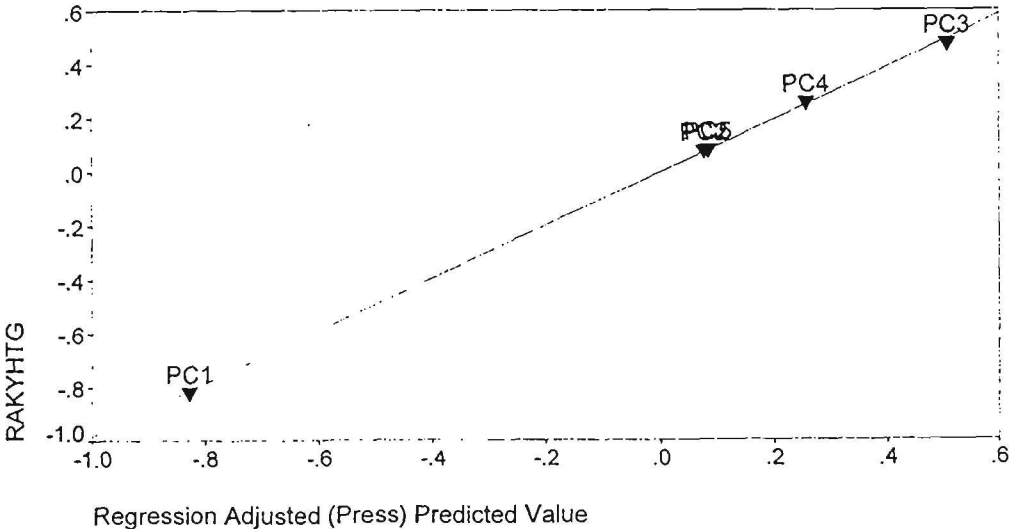
3D LOADING
PLOT

PC2
(12.4%)



SCATTER PLOT
PCNro RAKYHTG ADJPRED
PC1 -.81900 -.82828
PC2 .07802 .07641
PC3 .47680 .50565
PC4 .25712 .25559
PC5 .08239 .08313

Dependent Variable: RAKYHTG



RAKKOML and 24 compounds
correlating with $|R| > 0.7$

Principal Components Analysis (PC)

Initial Statistics:

Variable	PC	Eigenvalue	Pct of Var	Cum Pct
RAKKOLML	1	19.56181	78.2	78.2
AC1	2	3.22007	12.9	91.1
AC10	3	1.14722	4.6	95.7
AC2	4	.54957	2.2	97.9
AC36	5	.36492	1.5	99.4
AC5	6	.13576	.5	99.9
AC56	7	.02064	.1	100.0
AC8	8	.00000	.0	100.0

PC extracted 2 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa
AC36	.99891	.02958
N19	.98423	-.09685
N60	.98094	.05047
N49	.97774	-.17307
N23	.97693	-.16569
N48	.97397	-.19602
N33	.96761	-.22508
N78	.95890	-.26387
N39P6	.95254	-.20256
N44	.93369	-.34231
AN81	.91148	.30364
N53	.88681	-.44469
N25	.88396	-.44949
AC8	.88191	.36786
RAKKOLML	-.88031	-.16645
AC5	.86664	.18636
AC2	.86502	-.38903
AC56	.86105	.40060
AC1	.83077	-.20897
N86	.82448	-.46198
P38AC46	.81917	.52737
AC10	.78656	.58482
AN63	.69992	.69632
P40AN44	.69389	.65175
AN78	.56217	.21093
SUO	-.63421	.02146
KUNTA	-.38360	.17787
TCFOLD	-.17419	.14457
TCFOHD	2.19766	1.50865
TCFBLD	-.35677	-.63866
TCFBHD	1.48274	-2.18011
ECFOLD	-.72630	-.20768
ECFOHD	-.43180	-.10201
ECFBLD	-.68291	.07109
ECFBHD	-.29061	1.20483
Sample	PC1sco	PC2sco

PC extracted 5 factors.

PC Matrix:

	PC1loa	PC2loa	PC3loa	PC4loa	PC5loa
AC36	.99891	.02958	.01563	.02824	.00909
N19	.98423	-.09685	.08215	.11476	.02655
N60	.98094	.05047	.14402	.10662	.05347
N49	.97774	-.17307	.05640	.10415	.00631
N23	.97693	-.16569	.05282	.11625	.01300

N48	.97397	-.19602	.04697	.10352	.00131
N33	.96761	-.22508	.03155	.10880	-.00241
N78	.95890	-.26387	.01859	.10125	-.01362
N39P6	.95254	-.20256	.17579	-.10219	-.09706
N44	.93369	-.34231	-.01521	.09778	-.03121
AN81	.91148	.30364	.23399	.10150	.10368
N53	.88681	-.44469	-.06110	.09174	-.05480
N25	.88396	-.44949	-.06576	.09601	-.05396
AC8	.88191	.36786	-.07492	-.07374	-.25285
RAKKOLML	-.88031	-.16645	.33334	.10712	.07091
AC5	.86664	.18636	.29315	-.26959	-.23267
AC2	.86502	-.38903	-.03384	-.29692	-.09595
AC56	.86105	.40060	.19908	.03087	.23944
AC1	.83077	-.20897	-.02400	-.43262	.27678
N86	.82448	-.46198	-.25194	-.05497	.16890
P38AC46	.81917	.52737	.12022	-.17930	.02918
AC10	.78656	.58482	-.02274	.11629	-.14040
AN63	.69992	.69632	.05063	.06216	.13438
P40AN44	.69389	.65175	-.24751	.01483	.01449
AN78	.56217	.21093	-.79355	.02231	.01434
SUO	-.63421	.02146	-.45788	.66722	.29127
KUNTA	-.38360	.17787	-1.18532	-1.24129	2.15762
TCFOLD	-.17419	.14457	.67459	.69434	.21625
TCFOHD	2.19766	1.50865	.73910	.10973	.37464
TCFBLD	-.35677	-.63866	.61354	.83656	.21877
TCFBHD	1.48274	-2.18011	-.84424	-.03649	-.46753
ECFOLD	-.72630	-.20768	.91495	.33330	.04033
ECFOHD	-.43180	-.10201	1.09439	-2.26326	-1.07106
ECFBLD	-.68291	.07109	.24035	.75026	-.13578
ECFBHD	-.29061	1.20483	-1.78948	.14964	-1.62451
Sample	PC1sco	PC2sco	PC3sco	PC4sco	Pc5sco

P C R E G R E S S I O N

Dependent Variable.. RAKKOML

Method: Stepwise Criteria PIN .1500 POUT .3000
AC1 AC10 AC2 AC36 AC5 AC56 AC8 AN63 AN78 AN81 N19 N23
N25 N33 N39P6 N44 N48 N49 N53 N60 N78 N86 P38AC46 P40AN44

Variable(s) Removed on Step Number

4.. AC56

Multiple R .99954

R Square .99908

Adjusted R Square .99816

Standard Error .02002

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	2	.87214	.43607
Residual	2	.00080	.00040
F =	1088.24113	Signif F = .0009 ***	

----- Variables in the Equation -----

Variable	B	SE B	95% Confdnce	Intrvl B	Beta
AN78	-.442124	.024726	-.548512	-.335737	-.471049
AN81	-.902640	.036631	-1.060254	-.745026	-.649131
Const.	.193000	.015030	.128330	.257671	

----- in -----

Variable	T	Sig T		
AN78	-17.881	.0031	tetracosane	(-) **
AN81	-24.641	.0016	pentacosane derivative	(-) **
Constant	12.841	.0060		

----- Variables not in the Equation -----						
Variable	Beta In	Partial	Min Toler	T	Sig T	
AC1	-.049447	-.977379	.296208	-4.621	.1357	
AC10	.048134	.744804	.219811	1.116	.4651	
AC2	-.046456	-.631151	.136852	-.814	.5652	
AC36	-.033820	-.263164	.055587	-.273	.8305	
AC5	.035386	.197279	.020824	.201	.8736	
AC56	-.084218	-.712146	.065646	-1.014	.4954	
AC8	.080981	.752987	.079376	1.144	.4572	
AN63	.010807	.197669	.307167	.202	.8733	
N19	-.011494	-.151988	.150141	-.154	.9029	
N23	-.010163	-.150895	.186076	-.153	.9036	
N25	-.007794	-.157522	.316273	-.160	.8993	
N33	-.009750	-.155652	.210560	-.158	.9005	
N39P6	-.031354	-.331602	.078635	-.351	.7848	
N44	-.008811	-.159810	.261940	-.162	.8978	
N48	-.010503	-.159803	.191916	-.162	.8978	
N49	-.010855	-.159811	.180825	-.162	.8978	
N53	-.007975	-.159796	.310496	-.162	.8978	
N60	-.017445	-.159811	.074184	-.162	.8978	
N78	-.009620	-.159797	.224546	-.162	.8978	
N86	-.025746	-.553315	.419293	-.664	.6267	
P38AC46	-.005845	-.085192	.195040	-.086	.9457	
P40AN44	.022165	.325882	.198450	.345	.7887	

Variable(s) Entered on Step Number

5.. AC1

Multiple R .99998

R Square .99996

Adjusted R Square .99984

Standard Error 5.98730E-03

Analysis of Variance

	DF	Sum of Squares	Mean Square
Regression	3	.87291	.29097
Residual	1	.00004	.00004
F =	8116.78342	Signif F =	.0082 **

----- Variables in the Equation -----						
Variable	B	SE B	95% Confdnce	Intrvl B	Beta	
AC1	-.047173	.010208	-.176875	.082529	-.049447	
AN78	-.443502	.007401	-.537547	-.349458	-.472518	
AN81	-.846415	.016373	-1.054451	-.638379	-.608697	
Constant	.178572	.005473	.109026	.248118		

----- in -----

Variable	T	Sig T		
AC1	-4.621	.1357	methanoic acid	(-) -
AN78	-59.921	.0106	tetracosane	(-) *
AN81	-51.696	.0123	pentacosane derivative	(-) *
Constant	32.626	.0195		

PCNro RAKKOML ADJPRED

PC1 -.88031 -.91225

PC2 -.16645 -.15816

PC3 .33334 .47517

PC4 .10712 .09804

PC5 .07091 .14418

LIITE 7.

Näytteet, biologiset vaikutukset ja yhdisteryhmät: lyhenteet.

NÄYTTEET

SUO	Oriveden Lakkasuon vesi (laimennus mesokosmukseen 1:400)
KUNTA	Rauman kaupungin puhdistettu jätevesi (laimennus mesokosmukseen 1:400)
KUORI	Mäntykuorimon vesi
ECFO	ECF-mäntymassan kokonaisjätevesi ennen käsittelyä
ECFB	... pilotti-aktiivilietelaitoksen jälkeen
TCFO	TCF-mäntymassan kokonaisjätevesi ennen käsittelyä
TCFB	... pilotti-aktiivilietelaitoksen jälkeen
ECFOLD, ECFBLD, TCFOLD ja TCFBLD	("Low Dose", laimennus mesokosmukseen 1: 2000)
ECFOHD, ECFBHD, TCFOHD ja TCFBHD	("High Dose", laimennus mesokosmukseen 1:400)

BIOLOGISET VAIKUTUKSET

AKUUTTITOKSISUUSTESTIT

ALGAE	levätesti
LBACT	valobakteeritesti
MITOKOND	mitokondriotesti

MESOKOSMOSVAIKUTUKSET

Kirjolohtistust

LSI	maksan somaattinen indeksi
CF	kuntokerroin
HB	hemoglobiini
GROWTH	kalan keskimääräinen kasvu/vrk
HCT	hematokriitti
LCT	leukokriitti
MCHC	punasolujen keskimääräinen hemoglobiini
EROD	maksan entsyymi
UDP	maksan entsyymi
GLYC	maksan glykokeeni
LIPID	maksan lipidipitoisuus

Simpukan ja kolmipiikin rakennemuuttajat

BMG95	sinisimpukan keskikasvu v. 1995
BMG96	sinisimpukan keskikasvu v. 1996
SBMORT	kolmipiikin kuolleisuus
SBJUV96	kolmipiikin poikasten lukumäärä v. 1996
SBJUVG95	kolmipiikin poikasten kasvu v. 1995
SBJUVG96	kolmipiikin poikasten kasvu v. 1996

Sedimentin eliöiden biomassa

YHTG	kokonaisbiomassa
MACOM	<i>Macoma</i>
LYMNE	<i>Lymnea</i>
CARDI	<i>Hydrobia</i>
DNDRO	<i>Dendrocoleum</i>
HYDRO	<i>Hydrobia</i>
THEOD	<i>Theodoxus</i>
POLYC	<i>Polychaeta</i>

Rakkolevän eliöyhteisön biomassa

MYTILUS	<i>Mytilus</i>
LYMNEA	<i>Lymnea</i>
THEOD	<i>Theodoxus</i>
GAMMA	<i>Gammarus</i>
RAKYHTG	Rakkoleväeliöiden yhteisbiomassa
RAKKOML	Rakkoleväeliöiden yhteisbiomassa rakkolevä mukaan luettuna

YHDISTERYHMÄT

E	Eetterit
ETB	Etyylibentseeni
SHC	Tyydyttyneet alifaattiset ja alisykliset hiilivedyt
S	Rikkiyhdisteet
K	Ketonit
UHC	Tyydyttymättömät alifaattiset ja alisykliset hiilivedyt
ALC	Alkoholit
ALD	Aldehydit
TER	Terpeenialkoholit (bisykl.)
P	Fenolit
AMD	Amidit
PHT	Ftalaatit
PAD	Polyaromaaattiset johdokset
PHO	Fosfaatit
NIT	Nitraatit
STI	Stilbeneenijohdokset
RA	Hartsihapot
PHD	Fenantreenijohdokset 104,108,229
EST	Esterit
ARA	Aromaaattiset hapot
AMN	Amiinit
ALA	Alifaattiset karboksyylihapot

Kuvailulehti

Julkaisija	Suomen ympäristökeskus	Julkaisuaika	1998
Tekijä(t)	Jaakko Paasivirta* , Pirjo Mikkelsen* ja Reino Lammi ** *Jyväskylän yliopisto, kemian laitos,** UPM-Kymmene Oy, Wisaforest, Pietarsaari		
Julkaisun nimi	Happikemikaalien käyttöön perustuvan massanvalkaisun ympäristövaikutuksia Vaihe II. Vaikutusten ja orgaanisten yhdisteiden pitoisuuksien monimuuttuja-analyysi		
Julkaisun osat/ja muut saman projektin tuottamat julkaisut	Projektin vaiheesta I on ilmestynyt seuraavat julkaisut: Vesi- ja ympäristöhallinnon julkaisusarja A nro 189, Suomen ympäristökeskuksen monisteen nro 3, nro 4 ja nro 20 sekä The Finnish Environment sarjan julkaisu nro 17. Projektin vaiheesta II ovat ilmestyneet julkaisut: Suomen ympäristökeskuksen monistesarja nro III ja Suomen ympäristö nro 195.		
Tiivistelmä	<p>Projektin I vaiheen tulosten ja sen jälkeen tehdyn kirjallisuustutkimuksen perusteella pidettiin tarpeellisenä jatkaa projektia vaiheella II. Se sisälsi ECF- ja TCF-mäntymassan pilot-puhdistettujen jätevesien malliekosysteemitutkimuksia, kemiallista karakterisointia sekä jätevesien akuutteja screenaustestejä. Vertailukohteina tutkittiin myös yhdyskuntajätevettä ja suovettä.</p> <p>Monimuuttuja-analyysillä pyrittiin myrkyvaikutuksia ja mesokosmosten kroonisia efektejä selittämään kemiallisten yhdisteiden pitoisuuksien vaihteluilla. Tilastokäsittelyn perusteella valittiin vaikutuksen kanssa voimakkaimmin korreloivat aineet pääkomponenttianaalyyysiin. Akuuttia myrkyllisyyttä osoittivat levätestissä alifaattiset karboksyylihapot sekä tietyt yksittäiset yhdisteet. Osa yhdsiteryhmistä ja 10 yksittäistä ainetta osoittautuivat rakkoleväyhteisölle kasvun inhibiittoriksi. Merkitseviä stimulantteja havaittiin viisi, jotka vaikuttivat kalojen veriarvoihin sekä Macoman ja rakkoleväliöiden kasvuun. Tulosten perusteella voidaan valita jätevesien mahdollisten ekologisten vaikutusten kannalta merkittävimmät yhdisteet malliaineiksi jatkotutkimuksiin.</p>		
Asiasanat	selluteollisuus, valkaisu, jätevesi, kemiallinen karakterisointi, monimuuttuja-analyysi		
Julkaisusarjan nimi ja numero	Suomen ympäristökeskuksen moniste nro 118		
Julkaisun teema	ympäristönsuojelu		
Projektihankkeen nimi ja projektinumero	Happikemikaalien käyttöön perustuvan massanvalkaisun ympäristövaikutuksia, Vaihe II, nro xcl01		
Rahoittaja/toimeksiantaja	Enso Oy, Finnish Peroxides Oy, Kemira Chemicals Oy, Oy Metsä-Botnia Ab, UPM-Kymmene Oy, Suomen ympäristökeskus, Ympäristöministeriö		
Projektiryhmään kuuluvat organisaatiot	Enso Oy, Finnish Peroxides Oy, Kemira Chemicals Oy, Oy Metsä-Botnia Ab, UPM-Kymmene Oy, Suomen ympäristökeskus, Suomen ympäristötutkijaryhmä, Jyväskylän yliopisto, Keskuslaboratorio, LoSYK, LSYK,		
	ISSN	1455-0792	ISBN 952-II-0293-4
	Sivuja	119	Kieli suomi ; sisältäen engalnninkielisen yhteenvedon
	Luottamuksellisuus	Hinta -	
Julkaisun myynti/jakaja	Suomen ympäristökeskus, asiakaspalvelu , puh. 09-40300100, fax 09-40300190 PL 140 00251 Helsinki		
Julkaisun kustantaja	Suomen ympäristökeskus		
Painopaikka ja -aika	Helsinki 1998		
Muut tiedot			

ISBN 952-11-0293-4
ISSN 1455-0792